

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

DEPARTAMENTO DE FISICA

ASPECTOS ESTADISTICOS DE TRATAMIENTOS AUTOCONSISTENTES
EN SISTEMAS CUANTICOS DE MUCHOS CUERPOS

TESIS DOCTORAL

RAUL D. ROSSIGNOLI

1987

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
DEPARTAMENTO DE FISICA

ASPECTOS ESTADISTICOS DE TRATAMIENTOS AUTOCONSISTENTES EN SISTEMAS
CUANTICOS DE MUCHOS CUERPOS

TESIS DOCTORAL

RAUL DANTE ROSSIGNOLI

ANGEL L. PLASTINO
DIRECTOR

LA PLATA
1987

INDICE

Introducción	I
--------------------	---

CAPITULO I FORMALISMO GENERAL ESTADISTICO

Introducción	2
I.1 Descripción Estadística de un Sistema Cuántico	3
I.2 Determinación del Operador Estadístico	6
I.3 Propiedades Importantes del Operador Estadístico	11
I.4 La Aproximación Autoconsistente Generalizada	15
Referencias	21

CAPITULO II CUASIPARTICULAS INDEPENDIENTES EN SISTEMAS FERMIONICOS Y BOSONICOS

Introducción	24
II.1 El Operador Estadístico Fermiónico de Partícula Independiente	26
II.2 Inclusión de Términos de Apareamiento	35
II.3 El Operador Estadístico Bosónico General	40
II.4 Información Incompleta e Inferencia Estadística	52
II.5 La Aproximación Estadística Generalizada de Campo Medio en Sistemas Fermiónicos	57
II.6 La Aproximación Estadística Generalizada de Campo Medio en Sistemas Bosónicos	66
Apéndice A : Transformaciones y Operadores de un Cuerpo en Sistemas Fermiónicos :.....	69
Apéndice B : Transformaciones y Operadores de un Cuerpo en Sistemas Bosónicos	77

Apéndice C : Teorema de Wick para Sistemas Estadísticos	87
Referencias	91

CAPITULO III EFECTOS TERMICOS Y COMPETENCIA ENTRE INTERACCIONES DE DISTINTO CARACTER

Introducción	94
III.1 Descripción del modelo	96
III.2 Energías Libres Exactas	102
III.3 La Descripción de Cuasipartícula Independiente	108
III.4 La Aproximación de Cuasipartícula Independiente y la Exactitud en el Límite Termodinámico	113
III.5 La Solución de BCS Térmico	116
III.6 Apareamiento mas Fuerza Monopolar	123
III.7 Estadísticas Restringidas para Hamiltonianos Monopolares	129
III.8 La Aproximación de Hartree-Fock Térmico en un Conjunto Canónico	133
III.9 La Aproximación de Estados Coherentes	137
III.10 Fluctuaciones	139
Apéndice A : El Factor de Multiplicidad	145
Apéndice B : Estados Atómicos Coherentes	147
Referencias	151
Figuras	153

CAPITULO IV SISTEMAS BOSONICOS MONODIMENSIONALES

Introducción	168
IV.1 La Aproximación Térmica de Campo Medio en Potenciales Simétricos	170

IV.2	El Caso d-Dimensional	177
IV.3	Cotas Superiores Alternativas	179
IV.4	El Potencial λQ^{2n}	183
IV.5	Aplicación a Potenciales Asimétricos Generales	187
IV.6	El Oscilador Anarmónico General	190
IV.7	El Potencial Biestable	192
IV.8	Efectos de un Término Cúbico	195
IV.9	Cálculo de la Solución Exacta	199
Apéndice A : El Operador Estadístico Bosónico General		
	Monodimensional	202
	Referencias	208
	Tablas y Figuras	210

CAPITULO V TRATAMIENTOS AUTOCONSISTENTES EN LA EVOLUCION TEMPORAL DEL OPERADOR ESTADISTICO

Introducción	220
V.1 Evolución Temporal Exacta de Operadores Estadísticos	222
V.2 La Aproximación General Autoconsistente	226
V.3 La Aproximación Estadística de HFDT en Sistemas Fermiónicos y Bosónicos	231
V.4 Soluciones Estacionarias y Ecuaciones Linealizadas	238
V.5 Inferencia Estadística y Truncamiento en HFDT	241
Referencias	245

CAPITULO VI APLICACION A UN MODELO $U(n)$

Introducción	248
VI.1 Descripción del Modelo	249
VI.2 La Evolución Temporal Exacta	255

VI.3	La Aproximación Estadística de HFDT	258
VI.4	Ecuaciones linealizadas y Soluciones Estacionarias	260
VI.5	Inferencia Estadística y La Aproximación Restringida de HFDT	265
VI.6	Discusión y Resultados	269
	Apéndice A : Multiplicadores de Lagrange y Valores de Expectación en el Modelo $U(n)$ Restringido	273
	Apendice B : Soluciones de Hartree-Fock a $T = 0$	277
	Apendice C : Representaciones Irreducibles y Elementos de Matriz en $U(n)$	284
	Referencias	290
	Figuras	291
	Conclusión.....	297

INTRODUCCION

Las aproximaciones autoconsistentes de campo medio constituyen una de las más importantes herramientas teóricas para tratar el problema cuántico de muchos cuerpos, proporcionando una descripción y un punto de partida apropiados para desarrollos más complejos.

Dentro de este contexto, el objetivo de esta tesis es extender y analizar las teorías cuánticas de campo medio, tanto estáticas como dinámicas, en base a consideraciones de carácter estadístico, situándolas de este modo dentro de un marco más amplio y flexible que el usual.

La idea central que nos anima es la de basar la descripción de un sistema en un conjunto particular de observables, considerados relevantes para el fenómeno en estudio. Este modo de descripción es impulsado por la complejidad del problema cuántico de muchos cuerpos, y además, en ciertos casos por la necesidad de preservar sólo la información significativa acerca del sistema.

De este modo, se enfoca la atención sobre un subconjunto de variables, descartando las muchas otras restantes por medio de un adecuado esquema aproximado. Las teorías usuales de campo medio constituyen aquél caso especial de nuestro tratamiento en el que el conjunto de observables relevantes se encuentra formado por operadores de un cuerpo.

A tales efectos, se desarrolla un formalismo general apropiado que permite abordar este tipo de extensión. Se examinan en profundidad diversos tipos de situaciones específicas, abarcando situaciones de equilibrio (Cap. I-IV), como así también

problemas dependientes del tiempo (Cap. V-VI).

La Tesis se encuentra basada en los trabajos 1-2, 5-7, utilizándose también herramientas desarrolladas en los trabajos 3-4.

Referencias:

1. R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. C 30, 1360 (1984).
2. R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. C 32, 1040 (1985).
3. J. Nuñez, A. Plastino, R. Rossignoli and M. Cambiaggio, Nucl. Phys. A 444, 35 (1985).
4. N. Canosa, A. Plastino and R. Rossignoli, Nucl. Phys. A 453, 417 (1986).
5. J. Nuñez, A. Plastino and R. Rossignoli, Phys. Rev. D 33, 1709 (1986).
6. J. Nuñez, A. Plastino and R. Rossignoli, Journal of Physics A (en prensa).
7. R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. C (en prensa).

CAPITULO I

FORMALISMO GENERAL ESTADISTICO

INTRODUCCION

En este capítulo comenzaremos con la descripción estadística generalizada de un sistema cuántico arbitrario, basada en los lineamientos de la Teoría de la Información¹⁻³. Tal formulación incluye la descripción usual de sistemas en equilibrio⁴, pero es en realidad mucho más amplia. El formalismo es apto para tratar sistemas arbitrariamente lejos del equilibrio y procesos irreversibles⁵⁻⁷, y provee un camino apropiado para el paso de descripciones microscópicas a macroscópicas generales⁸. Además, permite extender conceptos termodinámicos y técnicas de la mecánica estadística a sistemas finitos, lo que lo hace especialmente apto para sistemas y modelos nucleares.

Dentro de este contexto, se resumen en las tres primeras secciones las características básicas de esta descripción estadística. Se consideran los aspectos estáticos, dejándose para el capítulo V los relacionados con la evolución temporal.

Finalmente se introduce en la sección 4 la aproximación autoconsistente generalizada, que permite una descripción aproximada basada en un conjunto particular arbitrario de observables. Tal aproximación constituye la generalización de las aproximaciones de campo medio a temperatura finita⁹⁻¹⁰, a operadores densidad arbitrarios y a un contexto estadístico completamente general.

I.1 DESCRIPCION ESTADISTICA DE UN SISTEMA CUANTICO

Consideremos un sistema cuántico caracterizado por un conjunto completo de observables linealmente independientes $\{\hat{O}_i, i=1, \dots, n\}$. El conjunto es completo en el sentido de que cualquier observable del sistema puede ser expresado como combinación lineal de los \hat{O}_i . El estado estadístico del sistema queda completamente caracterizado por el operador densidad $\hat{\rho}$ (llamado también operador estadístico)⁶, el cual juega el rol de una distribución de probabilidad en la mecánica estadística cuántica. El valor medio O_i de cualquier observable \hat{O}_i queda determinado por $\hat{\rho}$:

$$\begin{aligned} O_i &\equiv \langle \hat{O}_i \rangle \\ &= \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{O}_i] , \end{aligned} \quad (I.1.1)$$

donde la traza se efectúa sobre todo el conjunto de estados accesibles¹¹. El operador estadístico predice entonces los valores de expectación de todos los observables del sistema. Es un operador hermítico (de modo que O_i sea real si \hat{O}_i es hermítico) que supondremos normalizado:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^+ &= \hat{\rho} , \\ \langle I \rangle &= \text{Tr}[\hat{\rho}] = 1 , \end{aligned} \quad (I.1.2)$$

donde I denota la identidad en el espacio de Hilbert correspondiente. Si denotamos con $\{|l\rangle, l=1, \dots, q\}$ una base completa ortonormal de estados cuánticos del sistema,

$$I = \sum_1 |1\rangle\langle 1| \quad (I.1.3)$$

(de aquí en más, las sumas sobre un subíndice se realizan sobre todo los valores posibles de éste, a no ser que se indique lo contrario). Eligiendo la base como aquella formada por los autoestados de $\hat{\rho}$, podemos escribir

$$\hat{\rho} = \sum_1 |1\rangle p_1 \langle 1|, \quad 0 \leq p_1 \leq 1, \quad (I.1.4)$$

donde el conjunto de autovalores $\{p_1, 1=1, \dots, q\}$, representa la distribución de probabilidad asociada a $\hat{\rho}$. Por lo tanto, $\sum_1 p_1 = 1$. De este modo, el valor medio (I.1.1) puede expresarse en la forma de un doble promedio:

$$O_i = \sum_1 \langle 1 | \hat{O}_i | 1 \rangle p_1. \quad (I.1.5)$$

La entropía o falta de información¹⁻³ asociada a $\hat{\rho}$ se define como (asumiremos de aquí en más $k_B = 1$, donde k_B es la constante de Boltzmann)

$$\begin{aligned} S(\hat{\rho}) &\equiv -\langle \ln(\hat{\rho}) \rangle \\ &= -\text{Tr}[\hat{\rho} \ln(\hat{\rho})] \\ &= -\sum_1 p_1 \ln(p_1), \end{aligned} \quad (I.1.6)$$

y es una magnitud que juega un rol fundamental en todo tratamiento estadístico. Estados puros corresponden a $S = 0$ y operadores densidad idempotentes

$$\hat{\rho} = |k\rangle\langle k|, \quad (I.1.7)$$

donde $p_k=1$ para el estado 'ocupado' $|k\rangle$, y $p_l=0$ si $l \neq k$. En cualquier otro caso, $S(\hat{\rho}) > 0$, adquiriendo su valor máximo para una distribución equiprobable $p_l=p_k \forall k,l$. La entropía mide pues la falta de información relativa a un estado puro, en el cual las predicciones (valores medios) y distribuciones de probabilidad son lo más precisas y agudas posibles en la descripción cuántica.

El conocimiento de todos los valores medios O_i del conjunto completo determina algebraicamente a $\hat{\rho}$, pues el valor medio de cualquier observable \hat{A} es una función lineal de ellos:

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \sum_i c_i \hat{O}_i, \\ \langle \hat{A} \rangle &= \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{A}] = \sum_i c_i O_i.\end{aligned}\quad (\text{I.1.8})$$

Como base pueden utilizarse por ej., los operadores 'elementales'

$$\hat{Q}_{kl} = |k\rangle\langle l| = \hat{Q}_{lk}^+, \quad l, k = 1, \dots, q. \quad (\text{I.1.9})$$

Si se desean operadores hermíticos, pueden emplearse las partes real e imaginaria $\hat{Q}_{kl}^r = (\hat{Q}_{kl} + \hat{Q}_{lk})/2$, $\hat{Q}_{kl}^i = (\hat{Q}_{kl} - \hat{Q}_{lk})/2i$. Cualquier operador \hat{A} puede escribirse en la forma $\hat{A} = \sum_{k,l} \langle k|\hat{A}|l\rangle |k\rangle\langle l|$. En particular,

$$\hat{\rho} = \sum_{k,l} \langle \hat{Q}_{lk} \rangle |k\rangle\langle l|, \quad (\text{I.1.10})$$

de modo que $\text{Tr}[\hat{\rho} \hat{Q}_{lk}] = \langle \hat{Q}_{lk} \rangle$. Los autoestados de $\hat{\rho}$ pueden obtenerse diagonalizando la matriz $Q_{lk} = \langle \hat{Q}_{lk} \rangle = \langle k|\hat{\rho}|l\rangle$.

1.2 DETERMINACION DEL OPERADOR ESTADISTICO

No obstante, el problema fundamental de la mecánica estadística constituye la descripción de sistemas de los cuales sólo se posee una información parcial, basada en los valores de expectación de un conjunto reducido de observables $\{\hat{O}_i, i=1, \dots, m, m \leq n\}$ (que se suponen linealmente independientes), los cuales son accesibles al experimentador. Estos observables relevantes pueden ser operadores de muy diversa forma (por ej. variables macroscópicas, operadores colectivos o de partícula independiente, etc). Dado que el conjunto es reducido y no completo, existen muchos operadores estadísticos que proporcionan los mismos valores medios de los observables privilegiados. El criterio utilizado en estos casos para determinar el operador estadístico es el de máxima entropía³⁻⁴, según el cual debe elegirse aquél operador que además de proporcionar los valores medios conocidos, maximice la entropía, es decir, nuestra falta de información. De este modo, este operador estadístico posee la mínima información posible sobre los observables de los cuales se desconocen sus valores de expectación, consistente con la información conocida, no aportando por consiguiente información espúrea.

El problema matemático consiste en maximizar $S(\hat{\rho})$ con las m restricciones

$$\text{Tr}[\hat{\rho} \hat{O}_i] = O_i, \quad i=1, \dots, m. \quad (1.2.1)$$

Tal procedimiento puede ser llevado a cabo introduciendo m multiplicadores de Lagrange $\lambda_i, i=1, \dots, m$, y maximizando

libremente la función

$$S'(\hat{\rho}) = S(\hat{\rho}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \langle \hat{O}_i \rangle . \quad (I.2.2)$$

El resultado es^{9-4,12} (véase también la sección I.3)

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i \hat{O}_i\} , \quad (I.2.3)$$

donde λ_0 es una constante de normalización:

$$\lambda_0 = -\ln[\text{Tr}[\exp(\sum_{i=1}^m \lambda_i \hat{O}_i)]] . \quad (I.2.4)$$

Los m parámetros de Lagrange deben determinarse a partir de las restricciones (I.2.1). La solución (I.2.3) existe siempre y es única si los valores medios conocidos son físicamente aceptables (es decir, si existe al menos un operador densidad (I.1.4) que proporcione los valores (I.2.1)). La entropía máxima S adopta la expresión

$$S = -(\lambda_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i \langle \hat{O}_i \rangle) , \quad (I.2.5)$$

y por lo tanto,

$$S' = -\lambda_0 . \quad (I.2.6)$$

Resulta obvio que aún en el caso en que la información disponible sea completa, $\hat{\rho}$ es también de la forma (I.2.3), extendiéndose la suma hasta n . (I.2.3) constituye en este caso la expansión de $\ln(\hat{\rho})$ en la base de observables,

$$\ln(\hat{\rho}) = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i \hat{O}_i , \quad (I.2.7)$$

donde λ_0 puede interpretarse como el multiplicador correspondiente al operador identidad I (que no ha sido escrito en (I.2.3) y (I.2.7) para abreviar la notación). En el caso de información incompleta, la prescripción de máxima entropía implica simplemente $\lambda_i = 0$ para aquellos operadores \hat{O}_i cuyos valores medios son desconocidos. El caso puro (I.1.7) se obtiene como límite de (I.2.3) cuando algunos de los parámetros tienden a $\pm \infty$. Por ej., utilizando la forma diagonal (I.1.4) se obtiene $\ln(\hat{\rho}) = \sum_l \lambda_l |l\rangle\langle l|$ con $\lambda_l = \ln(p_l)$. En el caso (I.1.7), $\lambda_k = 0$, $\lambda_l = -\infty$, $l \neq k$.

El resultado es pues una distribución canónica generalizada. La situación usual de equilibrio corresponde al caso en que los observables \hat{O}_i conmutan con el hamiltoniano del sistema. Se reconocen inmediatamente las distribuciones canónica y gran canónica^{4,11},

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 - \beta \hat{H}\}, \quad (I.2.8)$$

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 - \beta \hat{H} - \lambda \hat{N}\}, \quad (I.2.9)$$

donde \hat{H} es el hamiltoniano del sistema, \hat{N} el operador número de partículas y β la inversa de la temperatura, que se obtienen cuando la información disponible consta sólo del valor medio de la energía (canónico), considerándose como estados accesibles sólo aquellos con el apropiado número de partículas, y valores medios de la energía y número de partículas (gran canónico). En este caso el conocimiento del número de partículas se considera como un valor medio adicional, y los estados accesibles no poseen un número fijo de partículas.

En rigor, la traza debe realizarse sólo sobre los estados

accesibles del sistema. La información certera de que el sistema no se encuentra en ciertos estados implica excluir a estos de la traza y del espacio de Hilbert correspondiente. Si no se posee ninguna otra información, todos los parámetros λ_i se anulan, obteniéndose de este modo una distribución del tipo microcanónico:

$$\hat{\rho} = \sum_k |k\rangle\langle k|/D, \quad (I.2.10)$$

donde D es el número de estados accesibles $|k\rangle$ (que suponemos ortonormales). En este caso $\hat{\rho}$ es simplemente un proyector, representando una distribución uniforme sobre los estados accesibles. La correspondiente entropía $S = \ln(D)$ es la máxima posible dentro del subespacio. El caso usual es aquél en que los estados accesibles poseen una energía definida E .

Notemos que en lugar de maximizar S' , es equivalente privilegiar uno de los observables, por ej. \hat{O}_1 , y minimizar la 'energía libre generalizada'

$$\begin{aligned} F(\hat{\rho}) &= S'(\hat{\rho})/\lambda_1 \\ &= \langle \hat{O}_1 \rangle - \sum_{i=2}^m \mu_i \langle \hat{O}_i \rangle - T_1 S(\hat{\rho}), \end{aligned} \quad (I.2.11)$$

donde $\mu_i = -\lambda_i/\lambda_1$ y $T_1 = -1/\lambda_1$, el cual se supone positivo (si es negativo se debe obviamente maximizar $F(\hat{\rho})$). Este procedimiento es más común en la literatura, y \hat{O}_1 es en general el hamiltoniano del sistema. El valor extremo F se obtiene para el operador estadístico (I.2.3) y puede expresarse como

$$F = -T_1 \ln [\text{Tr} \{ \exp(\langle \hat{O}_1 \rangle - \sum_{i=2}^m \mu_i \hat{O}_i) / T_1 \}] . \quad (I.2.12)$$

Es importante destacar que los observables \hat{O}_i son completamente arbitrarios en este formalismo, y el operador (I.2.3) no es necesariamente estacionario. El formalismo es pues apto para describir sistemas estáticos, y también fuera del equilibrio⁵⁻⁷, de los cuales se posee un conocimiento incompleto basado en los valores medios de un subconjunto arbitrario de observables. El operador estadístico (y por lo tanto el estado estadístico del sistema) queda determinado entonces por los m parámetros λ_i (o T_i y μ_i), o bien por los m valores medios O_i (que pueden ser considerados como parámetros de control y orden respectivamente) a través de la maximización de la entropía.

De este modo podemos utilizar este operador estadístico para predecir el valor medio de cualquier observable del sistema. Este proceso, por el cual se infiere el valor medio (a priori desconocido) de un observable dado a partir de los valores medios de un conjunto reducido de operadores, se denomina inferencia estadística. La bondad de la predicción depende del conjunto de observables relevantes, debiendo en todo caso incorporarse observables adicionales si se desea poseer una descripción más detallada.

I.3 PROPIEDADES IMPORTANTES DEL OPERADOR ESTADISTICO

Formularemos en esta sección ciertas propiedades^{6,12-18} vinculadas al operador (I.2.3), que serán de suma utilidad en el resto de esta tesis. En primer lugar, consideremos el operador no normalizado

$$\hat{\rho}' = \exp\left\{\sum_{i=1}^m \lambda_i \hat{O}_i\right\} . \quad (I.3.1)$$

Su derivada con respecto a λ_i es

$$\frac{\partial \hat{\rho}'}{\partial \lambda_i} = \hat{\rho}' \hat{O}_i^* , \quad (I.3.2)$$

donde \hat{O}_i^* representa la transformada de Kubo¹⁴ de \hat{O}_i respecto de $\hat{\rho}'$:

$$\begin{aligned} \hat{O}_i^* &= \int_0^1 (\hat{\rho}')^{-u} \hat{O}_i (\hat{\rho}')^u du \\ &= \int_0^1 \exp(-u\hat{A}) \hat{O}_i \exp(u\hat{A}) du , \end{aligned} \quad (I.3.3)$$

donde $\hat{A} = (\lambda_0 + \sum_i \lambda_i \hat{O}_i)$. La relación (I.3.2) puede demostrarse inmediatamente a partir del desarrollo en serie de la exponencial en (I.3.1) y (I.3.3). \hat{O}_i^* coincide con \hat{O}_i si $[\hat{A}, \hat{O}_i] = 0$, o sea, $[\hat{\rho}', \hat{O}_i] = 0$. No obstante, el valor medio de la transformada es siempre igual al del operador original, como puede verse a partir de la definición (I.3.3), intercambiando traza con integral,

$$\begin{aligned} \langle \hat{O}_i^* \rangle &= \text{Tr} \left[\int_0^1 \hat{\rho}'^{(-u+1)} \hat{O}_i \hat{\rho}'^{(u)} du \right] \\ &= \text{Tr} [\hat{\rho}' \hat{O}_i] . \end{aligned} \quad (I.3.4)$$

A partir de la relación fundamental (I.3.2) se deduce inmediatamente

$$\partial \lambda_o / \partial \lambda_i = -\langle \hat{O}_i \rangle , \quad (I.3.5)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \lambda_i} = \hat{\rho} (\hat{O}_i^* - \langle \hat{O}_i \rangle) . \quad (I.3.6)$$

La expresión (I.3.5) es muy útil para hallar la relación entre los multiplicadores y los correspondientes valores medios. Si α es un parámetro arbitrario relativo al sistema, utilizando (I.2.5) y (I.3.5) se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial \alpha} &= -\sum_{i=1}^m [(\partial \lambda_o / \partial \lambda_i + O_i) \partial \lambda_i / \partial \alpha + \lambda_i \frac{\partial O_i}{\partial \alpha}] \\ &= -\sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial O_i}{\partial \alpha} . \end{aligned} \quad (I.3.7)$$

En particular, se obtienen las importantes relaciones

$$\frac{\partial S}{\partial O_i} = -\lambda_i , \quad (I.3.8)$$

$$\frac{\partial S'}{\partial \lambda_i} = O_i , \quad (I.3.9)$$

que reflejan el hecho de que ambas magnitudes S y S' (consideradas como funciones de los parámetros O_i y λ_i , $i=1, \dots, m$, respectivamente) se hallan relacionadas por la transformada de Legendre (I.2.2).

La relación (I.3.7) puede utilizarse para verificar la propiedad de extremo del operador (I.2.3). En efecto, expandiendo $\ln(\hat{\rho})$ en la forma (I.2.7) y considerando como parámetros

variacionales los valores medios desconocidos O_k , $k=m+1, \dots, n$, la condición de máximo implica:

$$0 = \frac{\partial S(\hat{\rho})}{\partial O_k} = -\lambda_k, \quad k=m+1, \dots, n, \quad (I.3.10)$$

con lo cual se obtiene el resultado (I.2.3). A partir de (I.3.6) se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial O_i}{\partial \lambda_j} &= \text{Tr}[\hat{\rho} (\hat{O}_j^* - \langle \hat{O}_j \rangle) \hat{O}_i] \\ &= \langle \hat{O}_j^* \hat{O}_i \rangle - O_j O_i, \end{aligned} \quad (I.3.11)$$

de modo que si \hat{O}_i conmuta con $\hat{\rho}$, (I.3.11) coincide con la 'covarianza' $\langle \hat{O}_j^* \hat{O}_i \rangle - O_j O_i$. En particular si $i=j$, se obtiene la fluctuación o dispersión cuadrática media (o varianza) de \hat{O}_i . Además,

$$\begin{aligned} \frac{\partial O_i}{\partial \lambda_j} &= - \frac{\partial^2 \lambda_0}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \\ &= \frac{\partial O_j}{\partial \lambda_i}, \end{aligned} \quad (I.3.12)$$

con lo cual se verifica la propiedad $\langle \hat{O}_j^* \hat{O}_i \rangle = \langle \hat{O}_i^* \hat{O}_j \rangle$, obvia a partir de la definición (I.3.3). Utilizando (I.3.11) se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial \lambda_j} &= - \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial O_i}{\partial \lambda_j} = - \sum_{i=1}^m \lambda_i [\langle \hat{O}_i^* \hat{O}_j \rangle - O_i O_j] \\ &= - \sum_{i=1}^m \lambda_i [\langle \hat{O}_j^* \hat{O}_i \rangle - O_i O_j], \end{aligned} \quad (I.3.13)$$

donde la transformada de Kubo se 'cancela' debido a la suma sobre i . En caso de existir un solo operador, digamos \hat{O}_1 , en el

exponente de $\hat{\rho}$, la derivada de la entropía es directamente proporcional a la fluctuación:

$$\frac{\partial S}{\partial \lambda_1} = \lambda_1 \partial(O_1) / \partial \lambda_1 = \lambda_1 [\langle \hat{O}_1^2 \rangle - O_1^2] . \quad (I.3.14)$$

Las relaciones (I.3.8-9) implican

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \mu_i} &= -O_i , \quad i=2, \dots, m, \\ \frac{\partial F}{\partial T_1} &= -S . \end{aligned} \quad (I.3.15)$$

Otra propiedad importante de la entropía asociada al operador (I.2.3) es la concavidad⁶⁻¹⁸. Sean $\hat{\rho}^0$ y $\hat{\rho}^1$ dos operadores estadísticos que proporcionan valores medios O_i^0 y O_i^1 , $i=1, \dots, m$ respectivamente, y sea $\hat{\rho}^x$ la combinación lineal $\hat{\rho}^x = x\hat{\rho}^1 + (1-x)\hat{\rho}^0$, $0 \leq x \leq 1$, el cual proporciona los valores medios $O_i^x = xO_i^1 + (1-x)O_i^0$. Si $\hat{\rho}$ es el operador estadístico que maximiza la entropía proporcionando los valores O_i^x , se cumple la siguiente cadena de desigualdades:

$$S(\hat{\rho}) \geq S(\hat{\rho}^x) \geq xS(\hat{\rho}^1) + (1-x)S(\hat{\rho}^0) . \quad (I.3.16)$$

La primera desigualdad resulta obvia en virtud de la definición de $\hat{\rho}$. La segunda es consecuencia de la propiedad básica de concavidad de S , que puede derivarse de la concavidad hacia abajo de la función $-x \ln(x)$ en el intervalo $0 \leq x \leq 1$, de modo que $-\langle x \ln(x) \rangle \leq -\langle x \rangle \ln(\langle x \rangle)$.

I.4 LA APROXIMACION AUTOCONSISTENTE GENERALIZADA

Comenzaremos aquí con el desarrollo de las ideas centrales (y originales) de esta tesis. Supongamos que se desee realizar una descripción aproximada de un sistema basada en un conjunto privilegiado de observables elegido por el observador, al que denotaremos por $\{\hat{O}_j, j=1, \dots, k\}$. El correspondiente operador estadístico es entonces de la forma

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 + \sum_j \lambda_j \hat{O}_j\} . \quad (I.4.1)$$

Consideremos sin embargo el caso en que la información disponible se compone de m operadores $\{\hat{P}_i, i=1, \dots, m\}$, los cuales no coinciden necesariamente con los operadores \hat{O}_j . El operador estadístico exacto será por consiguiente

$$\hat{\rho}_{ex} = \exp\{\lambda_0^{ex} + \sum_i \lambda_i^{ex} \hat{P}_i\} . \quad (I.4.2)$$

No obstante, en la mayoría de las situaciones es muy difícil trabajar con el operador exacto (I.4.2). La conexión entre los multiplicadores λ_i^{ex} y los valores medios $P_i = \langle \hat{P}_i \rangle$ es en general complicada y requiere usualmente la diagonalización del exponente de $\hat{\rho}$, lo cual exige un extraordinario trabajo numérico si el número de estados accesibles es elevado. Además, el cálculo de valores medios de observables arbitrarios (inferencia estadística) resulta también complicado. Es por lo tanto deseable poseer una descripción aproximada basada en un operador densidad de la forma (I.4.1), donde los operadores \hat{O}_i se eligen de forma que (I.4.1) sea manejable. La concreción de esta inquietud es el 'leit motiv'

de esta tesis.

Nuestra idea es la de aproximar el operador (I.4.2) por uno de la forma (I.4.1), el cual debe ajustar los m valores medios P_i y a la vez maximizar la entropía (aproximada) $S(\hat{\rho})$. Si los operadores \hat{P}_i son linealmente independientes, es necesario que $m \leq k$ para que el problema tenga solución general. Pero aún en este caso el problema no siempre posee solución, pues el rango de valores de P_i predicho por (I.4.1) no coincide en general con el correspondiente a (I.4.2). Matemáticamente, el problema consiste en maximizar

$$S(\hat{\rho}) = -(\lambda_0 + \sum_j \lambda_j \langle \hat{O}_j \rangle) , \quad (I.4.3)$$

con las m restricciones

$$\text{Tr}[\hat{\rho} \hat{P}_i] = P_i , \quad (I.4.4)$$

lo cual es equivalente a maximizar libremente la magnitud

$$S'(\hat{\rho}) = -(\lambda_0 + \sum_j \lambda_j \langle \hat{O}_j \rangle) + \sum_i \beta_i \langle \hat{P}_i \rangle . \quad (I.4.5)$$

Los valores medios en (I.4.3-5) son tomados respecto del operador (I.4.1). Los parámetros β_i no coinciden en general con los λ_i^{ex} de (I.4.2). Considerando por comodidad como parámetros variacionales los valores medios O_j , se obtiene

$$0 = \frac{\partial S'(\hat{\rho})}{\partial O_j} = -\lambda_j + \sum_i \beta_i \frac{\partial P_i}{\partial O_j} , \quad (I.4.6)$$

donde hemos utilizado la relación (I.3.8). Por lo tanto, se obtiene el importante resultado

$$\lambda_j = \sum_i \beta_i \frac{\partial P_i}{\partial O_j} . \quad (I.4.7)$$

Los multiplicadores λ_j quedan vinculados a los $m \leq k$ parámetros β_i mediante (I.4.7). El operador estadístico aproximado adquiere la expresión

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_o + \sum_i \beta_i \hat{p}_i\} , \quad (I.4.8)$$

donde

$$\hat{p}_i = \sum_j \frac{\partial P_i}{\partial O_j} \hat{O}_j . \quad (I.4.9)$$

El operador (I.4.8) posee la misma forma que (I.4.2), excepto por el reemplazo de \hat{P}_i por el operador 'efectivo' no lineal \hat{p}_i , el cual es una combinación lineal de los operadores privilegiados \hat{O}_j pero con coeficientes que dependen de los valores medios O_j . El operador (I.4.8) es pues no lineal, dependiendo de los valores medios que a su vez determina. La solución 'formal' (I.4.8) implica entonces el sistema no lineal

$$\text{Tr}[\hat{\rho} \hat{O}_j] = O_j, \quad j=1, \dots, k. \quad (I.4.10)$$

El sistema (I.4.10) puede resolverse iterativamente partiendo de valores medios iniciales O_j^o (en principio arbitrarios). Con éstos se construyen los operadores \hat{p}_i^o por medio de (I.4.9) formando así el operador estadístico $\hat{\rho}^o$. Los valores O_j^1 del segundo paso se obtienen a partir de (I.4.10) utilizando $\hat{\rho}^o$. Se continúa así el proceso hasta obtener autoconsistencia, es decir, convergencia en los valores medios O_j , de modo que la diferencia de valores entre dos pasos sucesivos sea menor que un error

arbitrario. La convergencia puede depender de los valores medios iniciales elegidos y del valor de los parámetros β_i (considerados como fijos en todo este proceso), e incluso puede no existir.

En general, debido a la no linealidad, pueden existir varias soluciones estacionarias posibles, correspondiendo a máximos y mínimos locales, y puntos de ensilladura. No obstante, si bien la maximización directa es más eficaz para encontrar todas las soluciones estacionarias posibles, es difícil de implementar en el caso general.

Para valores dados de los parámetros β_i , existe siempre al menos una solución autoconsistente. No obstante, si se desea partir de los valores medios P_i , los parámetros β_i deben ser determinados a su vez por las condiciones (I.4.4). Es aquí donde puede ocurrir la imposibilidad de la determinación de $\hat{\rho}$. El valor medio P_i dado por (I.4.4) es en general una función complicada de los O_j , que no cubre todos los valores posibles de P_i . Esta no linealidad puede dar también origen a la posibilidad contraria de varias soluciones para los β_i , para valores fijos de P_i , de las cuales la correcta es en principio la de mayor entropía, debiendo descartarse mínimos y puntos de ensilladura. El conocimiento de valores medios adicionales puede ayudar a elegir el máximo correcto.

La excepción ocurre si los operadores \hat{P}_i son combinaciones lineales de los \hat{O}_j . En este caso, $\hat{P}_i = \sum_j c_j^i \hat{O}_j$ y se obtiene el resultado

$$\frac{\partial P_i}{\partial O_j} = c_j^i, \quad \lambda_j = \sum_i \beta_i c_j^i, \quad (\text{I.4.11})$$

con lo cual $\sum_j \lambda_j \hat{O}_j = \sum_i \beta_i \hat{P}_i$, tornándose exacta la aproximación.

Cabe destacar que en general, λ_o no coincide con $-S'$ en la aproximación autoconsistente,

$$S' = -\lambda_o - \sum_i \beta_i \langle \hat{p}_i - \hat{P}_i \rangle. \quad (I.4.12)$$

No obstante, las propiedades (I.3.8-9) siguen siendo válidas en virtud de la condición estacionaria (I.4.6) y (I.4.7):

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial P_i} &= -\sum_j \lambda_j \frac{\partial O_j}{\partial P_i} = -\sum_i \beta_i \frac{\partial P_i}{\partial P_i} \\ &= -\beta_i, \end{aligned} \quad (I.4.13)$$

$$\frac{\partial S'}{\partial \beta_i} = P_i, \quad (I.4.14)$$

donde hemos considerado a S como función de los P_i y S' como función de los β_i . Por lo tanto, en general $\frac{\partial \lambda_o}{\partial \beta_i} \neq -P_i$. A partir de (I.4.13) es fácil ver que la relación (I.3.7) se mantiene. Por ej.,

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_i} = -\sum_i \beta_i \frac{\partial P_i}{\partial \beta_i}. \quad (I.4.15)$$

No obstante, (I.4.15) no coincide en general con la suma de fluctuaciones (I.3.13), ya que los operadores reducidos dependen además de los β_i . Por la misma razón tampoco es válido (I.3.14).

Como se ha mencionado en la sección I.2, usualmente se trabaja con la 'energía libre generalizada'

$$F(\hat{\rho}) = \langle \hat{P}_1 - \sum_{i=2}^m \mu_i \hat{P}_i \rangle - T_1 S(\hat{\rho}) , \quad (I.4.16)$$

donde $T_1 = -1/\beta_1$, $\mu_i = T_1 \beta_i$, y $S(\hat{\rho})$ la entropía aproximada (I.4.3). El valor medio en (I.4.16) es tomado respecto de (I.4.1). Las condiciones $\frac{\partial F(\hat{\rho})}{\partial O_j} = 0$ conducen nuevamente a la relación

(I.4.7). Si el parámetro T_1 es positivo (negativo), la solución correcta es la que minimiza (maximiza) (I.4.16).

La aproximación autoconsistente constituye obviamente una cota inferior a la entropía exacta, para valores medios dados de los P_i , y una cota superior (si $T_1 > 0$) a la $F(\hat{\rho})$ exacta, para valores fijos de los parámetros β_i , dado que nos hemos restringido a un subconjunto particular de operadores estadísticos. La aproximación autoconsistente corresponde pues a un orden mayor que el dado por la solución exacta.

Si el conjunto $\{\hat{O}_j, j = 1, \dots, m\}$ está formado por operadores de un cuerpo, el tratamiento autoconsistente se reduce a la extensión estadística de las aproximaciones de campo medio. La fórmula (I.4.9) constituye en este caso la expresión general para el operador de campo medio no lineal efectivo, y el método recursivo se reduce a las ecuaciones de Hartree-Fock (o, en general, Hartree-Fock-Bogoliubov) estadísticas generalizadas, las que serán discutidas en el próximo capítulo.

Referencias:

1. C.E. Shannon, Bell Syst. Tech. J. 27 379, 623 (1948).
2. L. Brillouin, 'Science and Information Theory' (Academic Press, N.Y., 1956).
3. E. T. Jaynes, Phys. Rev. 106, 620 (1957); 108, 171 (1957).
4. A. Katz, 'Principles of Statistical Mechanics' (Freeman, San Francisco, 1967).
A. Hobson, 'Concepts in Statistical Mechanics' (Gordon and Breach, London, 1971).
5. R. Balescu, 'Equilibrium and non Equilibrium Statistical Mechanics' (Wiley, N.Y., 1975).
6. R. Balian, Y. Alhassid and H. Reinhardt, Phys. Rep. 131, 1 & 2 (1986).
7. W. T. Grandy, Phys. Rep. 62, 175 (1980).
8. D. Otero, A. Plastino, A. Proto and G. Zannoli, Phys. Rev. A 26, 1209 (1982).
J. Aliaga, M. Negri, D. Otero, A. Plastino, A. Proto, Phys. Rev. A (en prensa).
E. Duering, D. Otero, A. Plastino, A. Proto, Phys. Rev. A (en prensa).
9. D. J. Thouless, 'The Quantum Mechanics of Many Body Systems' (Academic, N.Y., 1961).
10. A. L. Goodman, N. Phys. A 352, 30 (1981).
11. F. Reif, 'Foundations of Statistical and Thermal Physics' (McGraw Hill, N.Y., 1965).
12. R. D. Levine and M. Tribus, 'The Maximum Entropy Formalism', 15-118 (MIT Press, Cambridge, 1979).

13. A. Wherl, Rev. Mod. Phys. 50, 221 (1978).
14. R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 12, 570 (1957); Rep. Progr. Phys. 29, 255 (1966).

CAPITULO II

CUASIPARTICULAS INDEPENDIENTES EN SISTEMAS FERMIONICOS Y BOSONICOS

INTRODUCCION

En este capítulo examinaremos el caso muy importante en que los operadores que forman el exponente del operador estadístico son operadores generales de un cuerpo¹⁻². Los así formados operadores estadísticos de partícula independiente (p.i.) y cuasipartícula independiente (c.i.) poseen ciertas ventajas esenciales. En primer lugar, la relación general entre los multiplicadores de Lagrange y los correspondientes valores de expectación puede hallarse explícitamente en forma general¹, eligiendo apropiadamente el conjunto de estados accesibles, en virtud de ciertas propiedades de transformación que poseen estos operadores (ver Apéndices A y B). En segundo lugar, es posible realizar fácilmente inferencias estadísticas sobre otros observables arbitrarios del sistema, no necesariamente de un cuerpo, lo cual permite además calcular los operadores efectivos correspondientes a la sección I.4 sin dificultad.

Los operadores de un cuerpo poseen también propiedades matemáticas atrayentes. Forman por ej., un conjunto cerrado bajo la operación de conmutación, satisfaciendo una correspondiente álgebra de Lie. Este hecho posibilita importantes ventajas en la descripción de la evolución temporal, como se verá en el capítulo V, y es en realidad subyacente a todas las propiedades particulares que exhiben estos operadores.

Físicamente, estos operadores resultan además los más fáciles de medir, y por consiguiente, la información experimental sobre un sistema se compondrá en general de valores medios de observables de un cuerpo, en adición probablemente a la energía y otros

invariantes (por ej. momento angular). Los operadores de un cuerpo pueden representar tanto grados de libertad de p.i., como así también operadores colectivos, formados como suma coherente sobre muchos operadores de un cuerpo 'elementales', los cuales brindan información sobre los modos coherentes de movimiento de las partículas que componen el sistema.

La descripción de c.i. constituye pues el punto de partida básico para el estudio de un sistema cuántico de muchos cuerpos. En las secciones 1-3 se examinan los operadores estadísticos de c.i. dentro de un contexto completamente general, en sistemas fermiónicos y bosónicos. En la sección 4 se aborda el problema de la inferencia estadística, el cual volverá a tratarse en el cap. VI. Las ecuaciones estadísticas autoconsistentes de campo medio se derivan en las secciones 5-6. Finalmente, se resumen en los apéndices las propiedades más importantes asociadas a los operadores de un cuerpo, incluyendo la versión estadística general del teorema de Wick.

II.1 EL OPERADOR ESTADISTICO FERMIONICO DE PARTICULA INDEPENDIENTE

Comenzaremos por estudiar el caso de un sistema finito de fermiones. Todo operador de un cuerpo fermiónico puede expresarse como combinación lineal de los operadores 'elementales'

$$\begin{aligned}\hat{A}_{ji} &= c_i^+ c_j \\ &= A_{ij}^+, \end{aligned} \tag{II.1.1a}$$

$$\begin{aligned}\hat{B}_{ji} &= c_i c_j, \\ \hat{B}_{ji}^+ &= c_j^+ c_i^+, \end{aligned} \tag{II.1.1b}$$

donde c_i^+ (c_i) denota el operador de creación (aniquilación) de un fermión en el estado de p.i. $|i\rangle$. El índice i denota un conjunto completo de números cuánticos que determinan unívocamente al estado. Si existen L estados de p.i. linealmente independientes en el sistema, entonces $i=1, \dots, L$. Los operadores de creación y aniquilación fermiónicos satisfacen las conocidas reglas de anticonmutación

$$\begin{aligned}[c_i^+, c_j^+]_+ &= 0, \\ [c_j, c_i]_+ &= 0, \\ [c_i, c_j^+]_+ &= \delta_{ij}, \end{aligned} \tag{II.1.2}$$

donde $[A, B]_+ = AB + BA$. En primer lugar, consideraremos el caso en que la información disponible se compone solamente de los valores medios de los operadores \hat{A}_{ij} . En otras palabras, supondremos que se posee el conocimiento de la matriz densidad de un cuerpo A

definida como⁹

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \langle c_j^+ c_i \rangle \\ &= \langle \hat{A}_{ij} \rangle . \end{aligned} \quad (\text{II.1.3})$$

La matriz A es obviamente hermitica. El correspondiente operador estadístico es entonces de la forma^{1,4}

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \exp\{\lambda_0 + \sum_{i,j} \lambda_{ij} c_i^+ c_j\} \\ &= \exp\{\lambda_0 + c^+ \Lambda c\} , \end{aligned} \quad (\text{II.1.4})$$

donde Λ denota la matriz de multiplicadores de Lagrange ($\Lambda_{ij} = \lambda_{ij}$) y c^+ , c , los vectores

$$c^+ = (c_1^+, \dots, c_L^+) , \quad c = \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_L \end{bmatrix} . \quad (\text{II.1.5})$$

Las relaciones de anticonmutación (II.1.2) pueden resumirse en

$$cc^+ - \{(c^+)^{\text{tr}} c^{\text{tr}}\}^{\text{tr}} = I , \quad (\text{II.1.6})$$

donde cc^+ denota el producto tensorial, tr la trasposición e I la matriz identidad de $L \times L$.

La condición de hermiticidad de $\hat{\rho}$ exige que la matriz Λ sea hermitica. El logaritmo de $\hat{\rho}$ es pues, un operador hermitico de un cuerpo, y por lo tanto, Λ puede ser diagonalizada por medio de una transformación lineal unitaria de los operadores c . (ver Apéndice A). $\hat{\rho}$ puede escribirse entonces en la forma diagonal (de p.i.)

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \exp\{\lambda_0 + \sum_i \lambda_i c_i'^+ c_i'\} \\ &= \exp\{\lambda_0 + c'^+ \Lambda' c'\} ,\end{aligned}\tag{II.1.7}$$

donde $\Lambda'_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}$, siendo λ_i los autovalores de la matriz Λ , y

$$\begin{aligned}c' &= Uc , \\ c'^+ &= c^+ U^+ ,\end{aligned}\tag{II.1.8}$$

es decir, $c_i' = \sum_j U_{ij} c_j$, $c_i'^+ = \sum_j U_{ij}^* c_j^+$, donde U es la matriz unitaria que diagonaliza Λ ,

$$U \Lambda U^+ = \Lambda' .\tag{II.1.9}$$

Tanto U como λ_i quedan determinados por la condición (II.1.9) que equivale a $[\ln(\hat{\rho}), c_i'] = \lambda_i c_i'$. Los operadores primados satisfacen nuevamente las condiciones (II.1.2) debido a la unitariedad de U .

La ventaja de la forma (II.1.7) es que permite vincular inmediatamente valores medios de p.i. con los correspondientes multiplicadores de Lagrange. A partir de (II.1.7) se obtiene

$$\begin{aligned}\langle c_i'^+ c_j' \rangle &= \text{Tr}[\hat{\rho} c_i'^+ c_j'] \\ &= f_i \delta_{ij} ,\end{aligned}\tag{II.1.10}$$

donde f_i ($0 \leq f_i \leq 1$) es el llamado número medio de ocupación. Su vinculación específica con los λ_i depende del conjunto de estados accesibles considerado. En un conjunto estadístico del tipo gran canónico, donde no existen limitaciones sobre el operador número de partículas

$$\hat{N} = \sum_i c_i^+ c_i = \sum_i c_i'^+ c_i' , \quad (\text{II.1.11})$$

los operadores \hat{A}_{ij} no están sujetos a ninguna restricción. El valor medio del número de partículas está incluido en el conocimiento de la matriz A: $\langle \hat{N} \rangle = \sum_i A_{ii} = \text{tr}[A]$ (de aquí en más, tr denota la traza sobre el espacio de una partícula (matrices de $L \times L$), a diferencia de Tr que actúa sobre el espacio (multiparticular) de Fock. Los estados accesibles son en este caso los 2^L estados

$$|n_1 \dots n_L\rangle = \prod_i (c_i^+)^{n_i} |0\rangle , \quad (\text{II.1.12})$$

donde $n_i = 0, 1$, es el número de ocupación del estado de p.i. $|i\rangle$, y $|0\rangle$ el vacío de los operadores c ($c_i |0\rangle = 0$). En este conjunto, las variables n_i son completamente independientes. Se obtiene entonces

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= -\ln\{\text{Tr}[\exp(c'^+ \Lambda' c')]\} \\ &= -\sum_i \ln\{1 + \exp(\lambda_i)\} \\ &= \sum_i \ln(1 - f_i) , \end{aligned} \quad (\text{II.1.13})$$

donde el número medio de ocupación está dado por la expresión de Fermi-Dirac⁵⁻⁶

$$\begin{aligned} f_i &= -\partial \lambda_0 / \partial \lambda_i \\ &= 1 / \{1 + \exp(-\lambda_i)\} . \end{aligned} \quad (\text{II.1.14})$$

De este modo, $N = \langle \hat{N} \rangle = \sum_i f_i$. Utilizando (II.1.13), es posible escribir $\hat{\rho}$ como el producto de L factores independientes

$$\begin{aligned}
\hat{\rho} &= \prod_i \{ \exp(\lambda_i c_i^+ c_i) / [1 + \exp(\lambda_i)] \} \\
&= \prod_i \{ [1 + (\exp(\lambda_i) - 1) c_i^+ c_i] / [1 + \exp(\lambda_i)] \} \\
&= \prod_i [(1 - f_i) + (2f_i - 1) c_i^+ c_i] . \quad (II.1.15)
\end{aligned}$$

A partir de (II.1.15) puede mostrarse fácilmente que la entropía adquiere la conocida expresión

$$\begin{aligned}
S &= -\text{Tr}[\hat{\rho} \ln(\hat{\rho})] \\
&= -\lambda_0 - \sum_i \lambda_i f_i \\
&= -\sum_i [f_i \ln(f_i) + (1 - f_i) \ln(1 - f_i)] . \quad (II.1.16)
\end{aligned}$$

No obstante, en muchos casos no se pueden admitir fluctuaciones en el número de partículas, y se debe trabajar en conjuntos estadísticos del tipo canónico. Las fórmulas (II.1.13-16) dejan entonces de ser válidas y es más difícil en general calcular la relación entre f_i y λ_i . Sin embargo, en ciertos casos es posible trabajar cómodamente aún en este tipo de conjuntos (véase Cap. III y Cap. VI). Conviene remarcar que en espacios finitos las trazas en los conjuntos canónico y gran canónico no coinciden, acentuándose la diferencia para valores pequeños de N .

Para hallar la relación general entre multiplicadores y valores medios en una base arbitraria, notemos que las matrices A y A son simultáneamente diagonales, y las cantidades f_i constituyen por consiguiente los autovalores de A . Es conveniente escribir A como el valor medio de un producto tensorial

$$\begin{aligned}
A &= \langle (c^+)^\dagger \text{tr}_c \text{tr} \rangle \text{tr} \\
&= I - \langle cc^\dagger \rangle,
\end{aligned}
\tag{II.1.17}$$

por lo que utilizando (II.1.8) se obtiene

$$A' = UAU^\dagger, \tag{II.1.18}$$

donde $A' = I - \langle c' c'^\dagger \rangle$, $A'_{ij} = f_i \delta_{ij}$. Por lo tanto, si $f_i = F(\lambda_i)$, entonces $A = F(\Lambda)$. Así, en el conjunto gran canónico, se obtiene la relación matricial¹

$$A = [I + \exp\{-\Lambda\}]^{(-1)}, \tag{II.1.19}$$

lo que implica

$$\begin{aligned}
A_{ij} &= [I + \exp\{-\Lambda\}]^{(-1)}_{ij} \\
&= -\partial \lambda_0 / \partial \lambda_{ji}.
\end{aligned}
\tag{II.1.20}$$

En el caso en que Λ sea diagonal, (II.1.20) es la expresión matricial de (II.1.14). Expresiones análogas se obtienen en otros conjuntos estadísticos especiales. La entropía (II.1.16) puede expresarse también como el producto escalar¹

$$\begin{aligned}
S &= -\lambda_0 - \sum_{i,j} \lambda_{ij} A_{ji} \\
&= -\lambda_0 - \text{tr}[\Lambda A].
\end{aligned}
\tag{II.1.21}$$

Estados puros ($S=0$) corresponden a $\lambda_i = \pm \infty$, o sea, $f_i = 0, 1$, respectivamente, en cuyo caso la matriz A es idempotente. El límite de $\hat{\rho}$ existe (ver II.1.15),

$$\lim_{\lambda_j \rightarrow \infty, \lambda_k \rightarrow -\infty} \hat{\rho} = \prod_j c_j'^+ c_j' \prod_k c_k' c_k'^+ \\ = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (\text{II.1.22})$$

y corresponde a un operador densidad idempotente, donde j (k) denota los estados ocupados (desocupados), es decir, $f_j=1$, $f_k=0$, y $|\psi\rangle$ el determinante de Slater

$$|\psi\rangle = \prod_j c_j'^+ |0\rangle. \quad (\text{II.1.23})$$

En el tratamiento estadístico, los números de ocupación y multiplicadores son extendidos al intervalo $0 \leq f_i \leq 1$, $-\infty < \lambda_i < \infty$. Obviamente, puede darse también el caso de sistemas mixtos, donde sólo algunos de los f_i son iguales a 1 (o 0), en cuyo caso el operador densidad es el producto de un factor de la forma (II.1.22) por un operador estadístico de entropía no nula definido en el espacio remanente. Esto corresponde a situaciones donde se tiene la certeza de que ciertos estados están ocupados, mientras que en los estados restantes sólo se posee el conocimiento de determinados valores medios, en los cuales pueden existir fluctuaciones.

En caso de existir una sola partícula en el sistema, $c_i'^+ c_j'$ es equivalente al operador $|i\rangle\langle j|$ (que actúa en el espacio de estados de una partícula). El operador densidad de una partícula

$$\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} c_i'^+ c_j', \quad (\text{II.1.24})$$

coincide en este caso con el operador $\hat{\rho}$ (II.1.4), como puede apreciarse al comparar (II.1.24) con (I.1.10) (el conjunto de operadores \hat{A}_{ij} es completo en este caso). Por lo tanto,

$\ln(\hat{A}) = \ln(\hat{\rho})$, es decir,

$$A = \exp\{\Lambda\} / \text{tr}[\exp(\Lambda)] , \quad (\text{II.1.25})$$

lo que implica, en particular, $f_i = \exp(\lambda_i) / [\sum_i \exp(\lambda_i)]$. Estos resultados difieren obviamente de los obtenidos en el tratamiento multiparticular en el conjunto gran canónico.

A partir de la matriz A, es posible calcular el valor medio de cualquier observable de un cuerpo \hat{O} ,

$$\hat{O} = \sum_{i,j} R_{ij} c_i^+ c_j = c^+ R c , \quad (\text{II.1.26})$$

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{O}] = \text{tr}[A O] , \quad (\text{II.1.27})$$

donde la matriz R es hermitica. El valor medio se expresa pues como un 'producto escalar' en el espacio de una partícula.

Si el conocimiento disponible consta del valor medio de m observables arbitrarios no necesariamente elementales $\hat{O}^i = c^+ R^i c$, $\hat{\rho}$ es de la forma (II.1.4), con Λ restringida a

$$\Lambda = \sum_{i=1}^m \beta_i R^i , \quad (\text{II.1.28})$$

donde β_i es el multiplicador asociado a \hat{O}_i . En realidad, dado que los observables físicos corresponden a operadores hermiticos, la información disponible provendrá siempre de operadores del tipo (II.1.26), y no directamente de los operadores elementales (II.1.1). No obstante, siempre es posible construir en forma inmediata la matriz D a partir de operadores elementales hermiticos

$$\hat{A}_{ij}^{\wedge} = \frac{1}{2} (\hat{A}_{ij} + \hat{A}_{ji}) , \quad \hat{A}_{ij}^{\vee} = -\frac{1}{2} i (\hat{A}_{ij} - \hat{A}_{ji}) , \quad (\text{II.1.29})$$

(i denota la unidad imaginaria) de modo que, en notación obvia,

$$\lambda_{ij} = \frac{1}{2} (\lambda_{ij}^{\wedge} - \lambda_{ij}^{\vee}) . \quad (\text{II.1.30})$$

Finalmente, cabe destacar que valores medios de operadores de dos o más cuerpos en el conjunto gran canónico y respecto de un operador densidad (II.1.4), pueden ser calculados (es decir, inferidos) fácilmente mediante el teorema de Wick (véase apéndice C), lo cual constituye una ventaja esencial de estos operadores estadísticos. Por ej., para un operador arbitrario de dos cuerpos, se obtiene

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 x_3 x_4 \rangle &= \text{Tr} [\hat{\rho} x_1 x_2 x_3 x_4] \\ &= \langle x_1 x_2 \rangle \langle x_3 x_4 \rangle + \langle x_1 x_4 \rangle \langle x_2 x_3 \rangle - \langle x_1 x_3 \rangle \langle x_2 x_4 \rangle, \quad (\text{II.1.31}) \end{aligned}$$

donde x_i denota un operador de creación o aniquilación, o una combinación lineal de ellos. Es obvio que contracciones del tipo $\langle c_i c_j \rangle$ son nulas respecto del operador (II.1.4). También es nulo el valor medio del producto de un número impar arbitrario de operadores x_i .

II.2 INCLUSION DE TERMINOS DE APAREAMIENTO

Si la información disponible incluye además valores medios no nulos de los operadores \hat{B}_{ij} (términos de 'apareamiento'), la generalización de las fórmulas anteriores es inmediata. El exponente del operador densidad es una forma cuadrática general en los operadores de creación y aniquilación²,

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \exp\{\lambda_0 + \sum_{i,j} [\lambda_{ij} c_i^+ c_j + \frac{1}{2}(\gamma_{ij} c_i c_j + \gamma_{ij}^* c_j^+ c_i^+)]\} \\ &= \exp\{\lambda_0' + \frac{1}{2}(Z^+ M Z)\} ,\end{aligned}\quad (\text{II.2.1})$$

donde $\lambda_0' = \lambda_0 + \frac{1}{2} \text{tr}[\Lambda]$, M es la matriz de multiplicadores

$$M = \begin{bmatrix} \Lambda & -\Gamma^* \\ \Gamma & -\Lambda^* \end{bmatrix} , \quad (\text{II.2.2})$$

y

$$Z^+ = (c_1^+, \dots, c_L^+, c_1, \dots, c_L) , \quad (\text{II.2.3})$$

siendo Z el adjunto de Z^+ (vector columna). La matriz Γ se define en forma análoga a Λ y es antisimétrica, $\Gamma_{ij} = \gamma_{ij} = -\gamma_{ji}$, con lo cual M resulta hermitica. Las relaciones de anticonmutación (II.1.2) pueden resumirse ahora como

$$ZZ^+ + \{(Z^+)^{\text{tr}} Z^{\text{tr}}\}^{\text{tr}} = I' , \quad (\text{II.2.4})$$

donde I' es la identidad de $2L \times 2L$. Definimos asimismo las matrices de valores medios³

$$B_{ij} = \langle c_j c_i \rangle , \quad (II.2.5)$$

$$D = \begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & I-A^* \end{pmatrix} \\ = I - \langle ZZ^+ \rangle . \quad (II.2.6)$$

B es el llamado tensor de apareamiento o 'pairing', y D la matriz densidad de un cuerpo generalizada, la cual puede escribirse como un producto tensorial, en forma similar a A. Siendo B antisimétrica, la matriz D resulta hermitica. M puede ser diagonalizada por medio de una transformación general de Bogoliubov (ver Apéndice A)

$$c'_i = \sum_j [U_{ij} c_j + V_{ij} c_j^+] , \quad (II.2.7)$$

que puede escribirse como

$$Z' = W Z , \quad (II.2.8)$$

con

$$W = \begin{pmatrix} U & V \\ V^* & U^* \end{pmatrix} . \quad (II.2.9)$$

La matriz W debe ser unitaria para que los operadores primados c'_i, c'^+_i , cumplan nuevamente con las condiciones (II.1.2) o (II.2.4). Los operadores primados son operadores de creación y destrucción de cuasipartículas⁹ si $V \neq 0$, en cuyo caso poseen un vacío diferente al de los operadores originales. Exigiendo que $[\ln(\hat{\rho}), c'^+_i] = \lambda_i c'^+_i$ podemos escribir el operador $\hat{\rho}$ nuevamente en la forma diagonal (de c.i.)

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \{\lambda'_0 + \frac{1}{2} Z'^+ M' Z'\} \\ &= \{\lambda'_0 + \sum_i \lambda_i c_i'^+ c_i'\} ,\end{aligned}\quad (\text{II.2.10})$$

donde

$$\begin{aligned}M' &= WMW^+ \\ &= \begin{bmatrix} A' & 0 \\ 0 & -A' \end{bmatrix} ,\end{aligned}\quad (\text{II.2.11})$$

$\lambda'_0 = \lambda'_0 - \frac{1}{2} \sum_i \lambda_i$, y $A'_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}$, siendo $\pm \lambda_i$ los autovalores de

M. Utilizando la forma (II.2.10) se obtiene

$$\langle c_i'^+ c_j' \rangle = f_i \delta_{ij} , \quad (\text{II.2.12a})$$

$$\langle c_i'^+ c_j'^+ \rangle = \langle c_j' c_i' \rangle^* = 0 , \quad (\text{II.2.12b})$$

donde rige para f_i la expresión (II.1.14). La traza del operador (II.2.1) sólo tiene sentido en un conjunto del tipo gran canónico, ya que $\ln(\hat{\rho})$ no conserva el número de partículas. Dado que $\langle c_i' c_i'^+ \rangle = (1 + \exp\{\lambda_i\})^{(-1)}$, podemos resumir las relaciones (II.2.12) en la forma matricial

$$D' = [I' + \exp\{-M'\}]^{(-1)} , \quad (\text{II.2.13})$$

donde

$$\begin{aligned}D' &= I' - \langle Z' Z'^+ \rangle \\ &= WDW^+ .\end{aligned}\quad (\text{II.2.14})$$

Utilizando (II.2.11), (II.2.13) y (II.2.14) se obtiene el resultado general

$$D = [I' + \exp\{-M\}]^{(-1)} . \quad (\text{II.2.15})$$

La fórmula (II.2.15) es válida en cualquier base y constituye la generalización de (II.1.19). Más explícitamente, a partir de (II.2.7) y (II.2.15) se obtienen las expresiones

$$\begin{aligned}\langle c_j^+ c_i \rangle &= [U^+ A' U + V^{tr} (I - A') V^*]_{ij} \\ &= -\partial \lambda'_0 / \partial \lambda_{ji} ,\end{aligned}\quad (II.2.16a)$$

$$\begin{aligned}\langle c_j c_i^+ \rangle &= [U^+ A' V + V^{tr} (I - A') U^*]_{ij} \\ &= -\partial \lambda'_0 / \partial \gamma_{ji} = \langle c_i^+ c_j^+ \rangle^*,\end{aligned}\quad (II.2.16b)$$

donde $A'_{ij} = f_i \delta_{ij}$. La constante de normalización λ'_0 no depende de la base:

$$\begin{aligned}\lambda'_0 &= -\ln \{ \text{Tr} [\exp(\frac{1}{2} Z^+ M Z)] \} \\ &= \sum_i [\ln(1 - f_i) + \frac{1}{2} \lambda_i] .\end{aligned}\quad (II.2.17)$$

Nuevamente, la entropía (II.1.16) puede expresarse como un producto escalar

$$S = -\{\lambda'_0 + \frac{1}{2} \text{tr}' [MD]\} ,\quad (II.2.18)$$

(tr' denota la traza sobre el espacio de dimensión $2L$) lo cual muestra claramente que S es invariante frente a transformaciones unitarias de p.i., ya sean del tipo (II.1.8) o (II.2.8). En otras palabras, S no depende de la base de p.i. elegida.

Estados puros corresponden ahora a matrices D idempotentes, o sea, $f_i = 0, 1$. EL operador $\hat{\rho}$ es en este caso nuevamente de la forma (II.1.22). Notemos que el determinante de Slater (II.1.23) puede considerarse como vacío de nuevos operadores fermiónicos

$c_j' = c_j'^+$, de modo que estados puros corresponden siempre a vacíos ($f_i = 0$, $\forall i$) de operadores apropiados.

En forma similar a la sección anterior, el valor medio de cualquier observable general de un cuerpo

$$\begin{aligned}\hat{O} &= \sum_{i,j} [R_{ij} c_i^+ c_j + \frac{1}{2} (\Delta_{ij} c_i c_j + \Delta_{ij}^* c_j^+ c_i^+)] \\ &= \frac{1}{2} Z^+ O Z + \frac{1}{2} \text{tr}[R] ,\end{aligned}\quad (\text{II.2.19})$$

con

$$O = \begin{bmatrix} R & -\Delta^* \\ \Delta & -R^* \end{bmatrix} , \quad (\text{II.2.20})$$

puede expresarse como

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{2} \{ \text{tr}'[DO] + \text{tr}[R] \} , \quad (\text{II.2.21})$$

y es evidentemente invariante frente a transformaciones (II.2.8).

Si la información proviene de m operadores $\hat{O}_i = \frac{1}{2} Z^+ O^i Z$, $\hat{\rho}$ es de la forma (II.2.1), con $M = \sum_i \beta_i O^i$.

El teorema de Wick sigue siendo válido para valores medios tomados respecto del operador general (II.2.1). La única diferencia es que existen ahora contracciones $B_{ij} = \langle c_i c_j \rangle$ (y por lo tanto, $\langle c_j^+ c_i^+ \rangle$) no nulas. Si bien los sistemas fermiónicos poseen en general un número fijo de partículas, el operador (II.2.1) es de suma utilidad en la aproximación de campo medio autoconsistente, donde es imprescindible poseer una matriz B no nula en ciertas circunstancias, las que serán discutidas en la sección II.5 y en el capítulo III.

II.3 EL OPERADOR ESTADISTICO BOSONICO GENERAL

Examinaremos en esta sección el operador densidad correspondiente a un sistema finito de bosones. Si bien el desarrollo es en general similar al de las secciones (II.1-2), existen ciertas diferencias de importancia que obligan a considerarlas en detalle. En un sistema bosónico, todo operador de un cuerpo puede expresarse en términos de combinaciones lineales de los operadores elementales

$$\begin{aligned}\hat{A}_{ij} &= b_j^+ b_i, \\ \hat{B}_{ij} &= b_j b_i, \quad \hat{B}_{ij}^+ = b_i^+ b_j^+, \\ b_i^+, b_j,\end{aligned}\tag{II.3.1}$$

en forma análoga a (II.1.1), pero donde hemos incluido además los operadores bosónicos b_i^+ , b_i , pues pueden existir en este caso términos lineales (y también constantes) en la expresión del operador. b_i^+ (b_i) crea (destruye) un bosón en el estado denotado por $|i\rangle$, y satisface las conocidas reglas de conmutación

$$\begin{aligned}[b_i, b_j] &= 0, \\ [b_j^+, b_i^+] &= 0, \\ [b_i, b_j^+] &= \delta_{ij}.\end{aligned}\tag{II.3.2}$$

Consideremos en primer lugar el caso en que la única información disponible se compone de los valores medios de los operadores \hat{A}_{ij} . Todo es entonces similar al caso fermiónico, salvo

la fórmula explícita del número de ocupación. La matriz densidad de un cuerpo A, de $L \times L$ (nuevamente supondremos que existen L estados de una partícula linealmente independientes) se define por

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \langle \hat{A}_{ij} \rangle \\ &= \langle b_j^\dagger b_i \rangle, \end{aligned} \quad (II.3.3)$$

lo cual puede reescribirse en la forma de un producto tensorial

$$\begin{aligned} A &= \langle (b^\dagger)_{tr} b_{tr} \rangle_{tr} \\ &= \langle b b^\dagger \rangle - I, \end{aligned} \quad (II.3.4)$$

donde hemos definido los vectores b , b^\dagger en forma similar a (II.1.5). Las relaciones (II.3.2) pueden resumirse en $b b^\dagger - \{(b^\dagger)_{tr} b_{tr}\}_{tr} = I$. El operador estadístico es de la forma

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \exp\{\lambda_0 + \sum_{i,j} \lambda_{ij} b_i^\dagger b_j\} \\ &= \exp\{\lambda_0 + b^\dagger \Lambda b\}, \end{aligned} \quad (II.3.5)$$

donde la matriz Λ es hermitica. Nuevamente, $\hat{\rho}$ puede ser llevado a la forma diagonal por medio de una transformación unitaria de los operadores b , de modo que podemos reescribir (II.3.5) como

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \exp\{\lambda_0 + \sum_i \lambda_i b_i'^\dagger b_i'\} \\ &= \exp\{\lambda_0 + b'^\dagger \Lambda' b'\}. \end{aligned} \quad (II.3.6)$$

donde

$$\Lambda' = U \Lambda U^\dagger, \quad (II.3.7)$$

$$b' = U b, \quad (II.3.8)$$

con $\Lambda'_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}$. Si la traza se efectúa en un conjunto canónico, donde el número total de bosones $\hat{N} = \sum_i b_i^\dagger b_i = \sum_i b_i'^\dagger b_i'$ está fijo, no existen restricciones sobre los λ_i . En cambio, en un conjunto gran canónico, con estados accesibles

$$|n_1 \dots n_L\rangle = \prod_i \left[\frac{(b_i^\dagger)^{n_i}}{(n_i!)^{1/2}} \right] |0\rangle, \quad (II.3.9)$$

donde los números de ocupación $n_i = 0, 1, \dots$, son completamente independientes, se requiere obviamente $\lambda_i < 0$ para que la traza converja, a diferencia del caso fermiónico. En este caso,

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= -\ln\{\text{Tr}[\exp(b'^\dagger \Lambda' b')]\} \\ &= \sum_i \ln[1 - \exp(\lambda_i)] \\ &= -\sum_i \ln(f_i + 1), \quad \lambda_i < 0, \end{aligned} \quad (II.3.10)$$

$$\langle b_i'^\dagger b_j' \rangle = f_i \delta_{ij}, \quad (II.3.11)$$

$$\langle b_i \rangle = \langle b_i^\dagger \rangle^* = 0, \quad (II.3.12)$$

donde f_i está dado por la expresión de Bose-Einstein⁷

$$f_i = -\partial \lambda_0 / \partial \lambda_i = [\exp(-\lambda_i) - 1]^{-1}. \quad (II.3.13)$$

Además, en forma análoga a (II.1.18-19), se obtiene la expresión general

$$\begin{aligned} A &= U^\dagger A' U \\ &= U^\dagger [\exp\{-\Lambda'\} - I]^{(-1)} U \\ &= [\exp\{-\Lambda\} - I]^{(-1)}. \end{aligned} \quad (II.3.14)$$

El operador estadístico puede escribirse como el producto de L factores independientes,

$$\hat{\rho} = \prod_i [\exp\{\lambda_i b_i'^+ b_i'\} / (1+f_i)] , \quad (II.3.15)$$

y la correspondiente entropía como el producto escalar

$$\begin{aligned} S &= -\lambda_o - \sum_i \lambda_i f_i \\ &= -\lambda_o - \text{tr}[AA] , \end{aligned} \quad (II.3.16)$$

expresión que se reduce a la conocida fórmula

$$S = \sum_i [(f_i+1)\ln(f_i+1) - f_i \ln(f_i)] . \quad (II.3.17)$$

Estados puros corresponden en el conjunto gran canónico sólo al caso $f_i = 0$ ($\lambda_i \rightarrow -\infty$) $\forall i$, es decir, $\hat{\rho} = |0\rangle\langle 0|$, donde $|0\rangle$ es el vacío de los operadores b . A diferencia del caso fermiónico, matrices A idempotentes no garantizan estados puros (y viceversa), pues los números de ocupación pueden ser mayores que uno, y por lo tanto, $0 \leq f_i < \infty$ en este conjunto.

Consideremos ahora la situación nueva en la cual se dispone del conocimiento de los valores medios $\langle b_i^+ \rangle$, $\langle b_i \rangle$. El operador densidad es entonces de la forma

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \exp\{\lambda_o + \sum_{i,j} \lambda_{ij} b_i^+ b_j + \sum_i (\eta_i b_i^+ + \eta_i^* b_i)\} \\ &= \exp\{\lambda_o + b^+ \Lambda b + \eta^+ b + b^+ \eta\} , \end{aligned} \quad (II.3.18)$$

donde $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_L)^{tr}$. Definiendo nuevos operadores bosónicos

$$b^c = b - d , \quad (II.3.19)$$

con d el vector

$$d = -\Lambda^{-1}\eta, \quad (II.3.20)$$

podemos reescribir $\hat{\rho}$ en la forma (II.3.5):

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0^c + b^{c+} \Lambda b^c\}, \quad (II.3.21)$$

donde $\lambda_0^c = \lambda_0 - d^+ \Lambda d = \lambda_0 - \eta^+ (\Lambda^{-1}) \eta$. Los operadores 'centrados' b^c satisfacen nuevamente las relaciones (II.3.2), y su definición es posible si Λ no posee autovalores nulos ($\lambda_i \neq 0$). Por lo tanto, dado que $\langle b_i^{c+} \rangle = \langle b_i^c \rangle = 0$, se obtiene

$$\langle b_i \rangle = \langle b_i^+ \rangle^* = d_i, \quad (II.3.22)$$

$$\langle b_i^+ b_j \rangle = \langle b_i^{c+} b_j^c \rangle + \langle b_i^+ \rangle \langle b_j \rangle,$$

o sea,

$$A = A^c + dd^+, \quad (II.3.23)$$

donde

$$A^c = [\exp(-\Lambda) - I]^{-1}, \quad (II.3.24)$$

representa la dispersión de A respecto de dd^+ . Notemos que la entropía (II.3.17) y los números medios de ocupación f_i dependen solamente de Λ , y no del vector η , como puede apreciarse a partir (II.3.21), lo que implica que son sensibles únicamente a la dispersión A^c , siendo independientes de la 'traslación' d . Es obvio que para que el operador (II.3.18) tenga sentido se debe trabajar en un conjunto del tipo gran canónico, pues $\ln(\hat{\rho})$ no conmuta con \hat{N} .

Pasemos ahora al caso general, en el que se incluyen además los operadores \hat{B}_{ij} . El operador estadístico será de la forma

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \exp\{\lambda_0 + \sum_{i,j} [\lambda_{ij} b_i^+ b_j + \frac{1}{2}(\gamma_{ij} b_i b_j + \gamma_{ij}^* b_j^+ b_i^+)] + \sum_i (\eta_i b_i^+ + \eta_i^* b_i)\} \\ &= \exp\{\lambda_0' + \frac{1}{2} (Z^+ M Z + F^+ Z + Z^+ F)\} ,\end{aligned}\quad (II.3.25)$$

donde en forma análoga a la sección II.2 hemos definido

$$Z^+ = (b_1^+, \dots, b_L^+, b_1, \dots, b_L) , \quad (II.3.26)$$

$$M = \begin{bmatrix} \Lambda & \Gamma^* \\ \Gamma & \Lambda^* \end{bmatrix} , \quad (II.3.27)$$

$$F^+ = (\eta_1^*, \dots, \eta_L^*, \eta_1, \dots, \eta_L) , \quad (II.3.28)$$

$$\lambda_0' = \lambda_0 - \frac{1}{2} \text{tr}[\Lambda] . \quad (II.3.29)$$

La matriz Γ ($\Gamma_{ij} = \gamma_{ij} = \gamma_{ji}$) es ahora simétrica, lo cual, junto con la hermiticidad de Λ , implica M hermitica. Definiendo nuevos operadores

$$Z^c = Z - T , \quad (II.3.30)$$

con

$$T = -M^{-1}F , \quad (II.3.31)$$

(II.3.25) puede reescribirse en la forma

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0^c + \frac{1}{2} Z^{c+} M Z^c\} , \quad (II.3.32)$$

donde $\lambda_0^c = \lambda_0' - \frac{1}{2} T^+ M T = \lambda_0' - \frac{1}{2} F^+ M^{-1} F$. De este modo, $\langle Z^c \rangle = \langle Z^{c+} \rangle = 0$. Al igual que en el caso fermiónico, (II.3.32) puede llevarse a la forma diagonal mediante una transformación general de Bogoliubov para bosones (ver apéndice B)

$$Z' = W Z^c , \quad (II.3.33)$$

con

$$W = \begin{pmatrix} X & Y \\ Y^* & X^* \end{pmatrix} . \quad (II.3.34)$$

Para que los operadores primados de Z' satisfagan nuevamente las relaciones (II.3.2), la matriz W debe ser unitaria respecto de la métrica

$$\Pi = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} , \quad (II.3.35)$$

es decir,

$$W^+ \Pi W = W \Pi W^+ = \Pi , \quad (II.3.36)$$

$$W^{-1} = \Pi W^+ \Pi . \quad (II.3.37)$$

Las relaciones de conmutación (II.3.2) pueden resumirse en el producto tensorial

$$ZZ^+ - \{(Z^+)^{tr} Z^{tr}\}^{tr} = \Pi . \quad (II.3.38)$$

De este modo, podemos escribir

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \exp\{\lambda_o^c + \frac{1}{2} Z'^+ M' Z'\} , \\ &= \exp\{\lambda_o^{''} + \sum_i \lambda_i b_i^{'+} b_i'\} , \end{aligned} \quad (II.3.39)$$

donde

$$\begin{aligned} M' &= (W^+)^{-1} M W^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} \Lambda' & 0 \\ 0 & \Lambda' \end{pmatrix} , \end{aligned} \quad (II.3.40)$$

con $\Lambda'_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}$ y $\lambda_o^{''} = \lambda_o^c + \frac{1}{2} \sum_i \lambda_i$. Tanto W como los autovalores λ_i quedan determinados por la condición $[\ln(\hat{\rho}), b_i^{'+}] = \lambda_i b_i^{'+}$.

Notemos que (II.3.40) implica la ecuación de autovalores $\Pi M W^{-1} = W^{-1} \Pi M'$, de modo que los parámetros λ_i son los autovalores

negativos de la matriz ΠM . Si bien M es hermítica, la matriz ΠM no lo es, de modo que λ_i puede ser complejo. En este caso, el correspondiente autovector posee norma nula (ver apéndice B) y no existe el respectivo bosón $b_i'^+$. Sólo consideraremos los casos en que el operador $\hat{\rho}$ posea norma finita, y por lo tanto M tenga autovalores reales $\lambda_i < 0$.

A partir de (II.3.39) se obtiene

$$\langle b_i'^+ b_j'^+ \rangle = \langle b_j' b_i' \rangle^* = 0, \quad (\text{II.3.41})$$

$$\langle b_i'^+ b_j' \rangle = f_i \delta_{ij},$$

$$\langle b_i' b_j'^+ \rangle = (1+f_i) \delta_{ij}, \quad (\text{II.3.42})$$

donde f_i está dado por (II.3.13). Definimos como en (II.2.6) la matriz densidad de un cuerpo generalizada

$$\begin{aligned} D &= \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & I+A^* \end{bmatrix} \\ &= \langle ZZ^+ \rangle - \Pi, \end{aligned} \quad (\text{II.3.43})$$

donde $B_{ij} = \langle b_j' b_i' \rangle = B_{ji} = \langle b_i'^+ b_j'^+ \rangle^*$. La matriz D es por lo tanto hermítica. Dado que $(1+f_i) = -1/[\exp(\lambda_i)-1]$, las relaciones (II.3.41-42) pueden resumirse en la igualdad matricial

$$\begin{aligned} D' &= \langle Z' Z'^+ \rangle - \Pi \\ &= [\exp\{-\Pi M'\} - I']^{(-1)} \Pi. \end{aligned} \quad (\text{II.3.44})$$

Para hallar la relación entre D^c y M , notemos que $\Pi M = \Pi W^+ M' W = W^{-1} \Pi M' W$, de modo que para una función G desarrollable en serie de potencias, $G(\Pi M) = W^{-1} G(\Pi M') W$ (y no $G(M) = W^+ G(M') W$). Por lo

tanto, utilizando (II.3.33) y (II.3.44), se obtiene

$$\begin{aligned}
 D^c &= \langle Z^c Z^{c+} \rangle - \Pi \\
 &= W^{-1} D' (W^{-1})^+ = W^{-1} (D' \Pi) W \Pi \\
 &= [\exp\{\Pi M\} - I']^{(-1)} \Pi ,
 \end{aligned} \tag{II.3.45}$$

o sea,

$$D^c = [\exp\left\{-\begin{pmatrix} \Lambda & \Gamma^* \\ -\Gamma & -\Lambda^* \end{pmatrix}\right\} - I']^{(-1)} \Pi . \tag{II.3.46}$$

Finalmente, para los operadores originales Z , se obtiene

$$D = D^c + \langle Z \rangle \langle Z^+ \rangle , \tag{II.3.47}$$

$$\langle Z \rangle = T . \tag{II.3.48}$$

Más explícitamente, (las sumas sobre k son para $k=1, \dots, 2L$)

$$\begin{aligned}
 \langle b_i \rangle &= T_i \\
 &= - \sum_k M_{ik}^{-1} F_k ,
 \end{aligned} \tag{II.3.49}$$

$$\langle b_i^+ b_j \rangle = [X^+ A' X + Y^{tr} (I + A') Y^*]_{ji} + \langle b_i^+ \rangle \langle b_j \rangle , \tag{II.3.50}$$

$$\begin{aligned}
 \langle b_i b_j \rangle &= [-X^+ A' Y - Y^{tr} (I + A') X^*]_{ji} + \langle b_i \rangle \langle b_j \rangle \\
 &= \langle b_i^+ b_j^+ \rangle^* .
 \end{aligned} \tag{II.3.51}$$

El multiplicador λ_0 queda finalmente expresado como

$$\lambda_0 = \lambda_0'' - \frac{1}{2} \text{tr}[\Lambda' - \Lambda] + \frac{1}{2} F^+ M^{-1} F , \tag{II.3.52}$$

donde λ_0'' está dado por la expresión (II.3.10). Se verifican las relaciones

$$\partial \lambda_o / \partial \lambda_{ij} = -\langle b_i^+ b_j \rangle ,$$

$$\partial \lambda_o / \partial \gamma_{ij} = -\langle b_i b_j \rangle , \quad (II.3.53)$$

$$\partial \lambda_o / \partial \eta_i = -\langle b_i \rangle .$$

La entropía puede expresarse como el producto escalar

$$\begin{aligned} S &= -(\lambda_o' + \frac{1}{2} \text{tr}[MD] + F^+ \langle Z \rangle) \\ &= -(\lambda_o'' + \frac{1}{2} \text{tr}[MD^c]) \\ &= - \sum_i [(f_i + 1) \ln(f_i + 1) - f_i \ln(f_i)] , \quad (II.3.54) \end{aligned}$$

y es evidentemente invariante frente a transformaciones de Bogoliubov (II.3.33). Más aún, conviene recalcar que la entropía no depende de los multiplicadores η_i (o sea, del vector F) que implican traslaciones no nulas, dependiendo sólo de la matriz M . Lo mismo sucede con los autovalores λ_i y los números de ocupación f_i , que quedan determinados por M . La entropía es, pues, función únicamente de la dispersión D^c , no siendo afectada por las traslaciones representadas por $\langle Z \rangle$.

Valores medios físicamente aceptables (que cumplen por ejemplo, con el principio de incerteza) corresponden a operadores $\hat{\rho}$ normalizados (véase por ej. cap. IV, apéndice A). En este caso, las matrices ΠM , y $D\Pi$ son diagonalizables, con autovalores reales $\lambda_i < 0$, $f_i \geq 0$, respectivamente. El vector F y los valores medios $\langle b_i \rangle$ pueden ser sin embargo arbitrarios, aunque siempre en presencia de una matriz M de la forma anterior, en cuyo caso resulta invertible.

El valor medio de un observable arbitrario de la forma

$$\hat{O} = \frac{1}{2}[Z^+ O Z + G^+ Z + Z^+ G] , \quad (II.3.55)$$

donde la matriz hermítica O (de $2L \times 2L$) y G^+ (de $1 \times 2L$) se definen en forma similar a (II.3.27-28), puede expresarse como

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{2} \text{tr}'[O D] + G^+ \langle Z \rangle . \quad (II.3.56)$$

Obviamente, si la información disponible se compone de los valores medios de m observables O_i de la forma (II.3.55), entonces $\hat{\rho}$ es de la forma (II.3.25) con $M = \sum_i \beta_i O_i$, $F = \sum_i \beta_i G_i^+$, donde β_i es el multiplicador asociado a \hat{O}_i .

Un caso muy importante es aquél en que la información se expresa en términos de las coordenadas e impulsos, definidos por

$$\begin{aligned} \hat{P}_i &= -i(b_i - b_i^+)/2^{1/2} , \\ \hat{Q}_i &= (b_i + b_i^+)/2^{1/2} , \\ [\hat{Q}_i, \hat{P}_j] &= i \delta_{ij} . \end{aligned} \quad (II.3.57)$$

Todo el formalismo anterior puede repetirse en términos de los operadores hermíticos \hat{P}_i y \hat{Q}_i . Así, el exponente del operador estadístico (II.3.25) es una función cuadrática hermítica general en \hat{P}_i y \hat{Q}_i , la transformación (II.3.33) una transformación canónica lineal general, y (II.3.19) una traslación (véase apéndice B). Notemos que en términos de coordenadas e impulsos primados (construidos como en (II.3.57) a partir de b' , b'^+), el exponente del operador estadístico diagonal (II.3.39) es una suma de osciladores armónicos,

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda'_0 + \sum_i \frac{1}{2}\lambda_i (\hat{Q}_i'^2 + \hat{P}_i'^2 - 1)\} . \quad (\text{II.3.58})$$

Por consiguiente, el sistema bosónico considerado puede representar también un sistema de L partículas en la representación de coordenadas e impulsos, y (II.3.25) el caso donde la información está restringida a formas cuadráticas y lineales en \hat{P}_i y \hat{Q}_i . En este caso, el conjunto gran canónico resulta natural y necesario para poder cubrir la totalidad del espacio de Hilbert correspondiente. Esta analogía será explotada y analizada con más detalle en el capítulo IV.

La independencia de la entropía S respecto de $\langle Z \rangle$ resulta entonces obvia en virtud de que $\langle b_i \rangle$, $\langle b_i^+ \rangle$, sólo determinan los valores medios $\langle \hat{P}_i \rangle$, $\langle \hat{Q}_i \rangle$, o sea, el origen de coordenadas de los osciladores que aparecen en (II.3.58).

II.4 INFORMACION INCOMPLETA E INFERENCIA ESTADISTICA

Las expresiones (II.2.15) y (II.3.45) permiten hallar la matriz densidad de un cuerpo generalizada a partir de la matriz M de multiplicadores. Examinaremos en esta sección el problema inverso¹, con el objeto de ilustrar ciertas posibilidades del tratamiento general estadístico. Consideremos en primer lugar un sistema de fermiones. En función de D , la matriz M en el conjunto gran canónico está dada por

$$M = -\ln[D^{-1} - I'] , \quad (II.4.1)$$

Si el conocimiento de D es completo, (II.4.1) resuelve el problema de la determinación de M . Las matrices D físicas son aquellas con autovalores f_i comprendidos entre 0 y 1, para las cuales está definida la expresión (II.4.1). No obstante, en muchos casos la matriz D no es conocida en su totalidad, y sólo se dispone del conocimiento de algunos elementos D_{ij} . Es en esta situación donde es más útil el formalismo estadístico general, pues permite obtener resultados (es decir, inferencias estadísticas a partir de los valores medios de un conjunto reducido de observables) aún en este caso. Si el conocimiento de D es incompleto, el principio de máxima entropía determina la forma de la matriz M , asignando el valor 0 a aquellos elementos $\lambda_{ij}, \gamma_{ij}$ para los cuales $\langle c_i^+ c_j \rangle, \langle c_i c_j \rangle$, son desconocidos. La relación fundamental (II.4.1) se transforma en este caso en un sistema de ecuaciones,

$$0 = \{\ln[D^{-1} - I']\}_{ij} , \quad (II.4.2)$$

donde los índices i, j corresponden a los elementos desconocidos D_{ij} . La resolución de (II.4.2) determina los valores de los elementos desconocidos de D , los cuales poseen el significado de maximizar la entropía para valores fijos de los restantes elementos conocidos. Estos valores son así obtenidos por inferencia estadística, a través de la maximización de la falta de información. La expresión matricial (II.2.15) de la relación de Fermi Dirac no constituye solamente la generalización de (II.1.14) a una base de p.i. arbitraria, pues simboliza en realidad un sistema no lineal de ecuaciones en el caso de información inicial incompleta.

La forma de la matriz M determina la correspondiente a D . Por ejemplo, si los ceros de M son tales que ésta queda bloqueada en submatrices cuadradas en la diagonal, y restantes elementos nulos, D tendrá obviamente la misma forma, no existiendo inferencia estadística entre bloques y dependiendo los valores medios desconocidos sólo de los elementos conocidos del bloque al cual pertenecen.

Como ejemplo, consideremos el caso en que se dispone del conocimiento de $\langle \hat{N} \rangle$ y un dado elemento $\langle c_i^+ c_j \rangle$. Por lo tanto, $\gamma_{kl} = 0$, por lo que $B_{kl} = 0$, $\forall k, l$. Si $i = j$, entonces

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 + \lambda_1 \hat{N} + \lambda_2 c_i^+ c_i\}, \quad (\text{II.4.3})$$

y por lo tanto,

$$\langle c_i^+ c_i \rangle = \{1 + \exp[-(\lambda_2 + \lambda_1)]\}^{-1}, \quad (\text{II.4.4})$$

$$\begin{aligned} \langle c_k^+ c_l \rangle &= \delta_{kl} \{1 + \exp(-\lambda_1)\}^{-1} \\ &= \delta_{kl} \{[\langle \hat{N} \rangle - \langle c_i^+ c_i \rangle] / (L-1)\}, \quad k \neq i, \quad (\text{II.4.5}) \end{aligned}$$

donde L es el número de estados de una partícula accesibles. La inferencia estadística resulta entonces trivial, dando como resultado un poblamiento equiprobable de los estados distintos al $|i\rangle$. Si en cambio, $i \neq j$,

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 + \lambda_1 \hat{N} + \lambda_2 c_i^+ c_j + \lambda_2^* c_j^+ c_i\}, \quad (\text{II.4.6})$$

$$\langle c_k^+ c_l \rangle = \delta_{kl} [1 + \exp(-\lambda_1)] , \quad i \neq k \neq j , \quad (\text{II.4.7})$$

$$\begin{pmatrix} \langle c_i^+ c_i \rangle & \langle c_j^+ c_i \rangle \\ \langle c_i^+ c_j \rangle & \langle c_j^+ c_j \rangle \end{pmatrix} = \left\{ I + \exp \left[- \begin{pmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 \\ \lambda_2^* & \lambda_1 \end{pmatrix} \right] \right\}^{-1} . \quad (\text{II.4.8})$$

Para una matriz $A = \begin{pmatrix} a & c^* \\ c & b \end{pmatrix}$ y una función F desarrollable en serie de potencias, se obtiene, mediante la diagonalización de A ,

$$F(A) = \begin{pmatrix} s+r(a-b)/t & 2c^* r/t \\ 2cr/t & s+r(b-a)/t \end{pmatrix}, \quad (\text{II.4.9})$$

donde $t = d_+ - d_-$, $r = \frac{1}{2}[F(d_+) - F(d_-)]$, $s = \frac{1}{2}[F(d_+) + F(d_-)]$, siendo d_+ y d_- los autovalores de A . Por lo tanto, utilizando (II.4.9),

$$\begin{aligned} \langle c_i^+ c_i \rangle &= \frac{1}{2}(f_+ + f_-) = \langle c_j^+ c_j \rangle, \\ \langle c_i^+ c_j \rangle &= \frac{1}{2}(f_+ - f_-)(\lambda_2^* / |\lambda_2|) = \langle c_j^+ c_i \rangle^*, \end{aligned} \quad (\text{II.4.10})$$

con

$$f_\nu = [1 + \exp(-d_\nu)]^{-1}, \quad (\text{II.4.11})$$

$$d_\nu = \lambda_1 + \nu |\lambda_2|, \quad \nu = \pm 1.$$

La inferencia estadística resulta ahora no trivial, y las relaciones (II.4.10) implican el sistema de ecuaciones

$$(L-2)f_0 + f_+ + f_- = N , \quad (II.4.12)$$

$$\frac{1}{2}(f_+ - f_-) = |\langle c_i^+ c_j \rangle| ,$$

donde

$$f_0 = [1 + \exp(-\lambda_1)]^{-1}$$

$$= \{1 + [(1-f_+)(1-f_-)/f_+f_-]^{1/2}\}^{-1} . \quad (II.4.13)$$

Por lo tanto, la resolución del sistema (II.4.12) proporciona los valores desconocidos $\langle c_k^+ c_k \rangle$, $\langle c_i^+ c_i \rangle$, que maximizan la falta de información.

Valores no nulos de $\langle c_i^+ c_j \rangle$, inducen un aumento en el número medio de ocupación $\langle c_i^+ c_i \rangle = \langle c_j^+ c_j \rangle$ si $N < L/2$, y una disminución si $N > L/2$, lo que puede interpretarse como un aumento en el número de agujeros $1 - \langle c_i^+ c_i \rangle$. El valor de $f_0 = \langle c_k^+ c_k \rangle$ exhibe el comportamiento inverso. En el caso particular $N = L/2$, todos los números medios de ocupación son iguales a $\frac{1}{2}$, independientemente del valor de $\langle c_i^+ c_j \rangle$. No obstante, la entropía es en todos los casos una función decreciente de $|\langle c_i^+ c_j \rangle|$. El máximo valor posible de $|\langle c_i^+ c_j \rangle|$ es $\frac{1}{2}$, en cuyo caso $(|f_+ - f_-| = 1)$. Otro ejemplo de inferencia estadística no trivial se analizará en el capítulo VI.

Los comentarios anteriores sobre inferencia estadística son obviamente también válidos en un sistema bósónico. En lugar de (II.4.1), se obtiene (véase (II.3.45-46))

$$M = -M \ln[(D^c \Pi)^{-1} + I'] , \quad (II.4.14a)$$

$$F = -M \langle Z \rangle . \quad (II.4.14b)$$

La matriz D^c debe poseer autovalores positivos. No existen en cambio restricciones sobre $\langle Z \rangle$. (II.4.14) se convierte en un

sistema de ecuaciones en el caso de información incompleta. En el ejemplo anterior, las relaciones (II.4.12) siguen siendo válidas, pero (II.4.13) debe reemplazarse por

$$\begin{aligned} f_0 &= [\exp(\lambda_1) - 1]^{-1} \\ &= \{-1 + [(1+f_+)(1+f_-)/f_+f_-]^{1/2}\}^{-1}. \quad (\text{II.4.15}) \end{aligned}$$

En este caso se observa siempre un aumento en el valor de $\langle c_i^+ c_i \rangle$, para cualquier $N > 0$.

II.5. LA APROXIMACION ESTADISTICA GENERALIZADA DE CAMPO MEDIO EN SISTEMAS FERMIONICOS

Desarrollaremos en esta sección la extensión estadística general de la aproximación autoconsistente de campo medio. La idea básica consiste en aproximar el operador estadístico exacto por un operador general de partícula o cuasipartícula independiente. En otras palabras, se reemplaza el exponente del operador densidad por un operador óptimo general de un cuerpo, obteniéndose de este modo una descripción aproximada del sistema basada en observables de un cuerpo.

Cuando la información disponible se compone de valores medios de operadores de dos o más cuerpos, el correspondiente operador estadístico exacto resulta extremadamente difícil de manejar. No es posible encontrar fórmulas sencillas que vinculen multiplicadores con valores medios, y resulta además difícil realizar predicciones o inferencias estadísticas de otros operadores. Es necesario en general efectuar la diagonalización de $\ln(\hat{\rho})$, el cual es un operador de dos o más cuerpos, lo que exige un extraordinario trabajo numérico si el número de estados accesibles es elevado. Resulta por tanto conveniente poseer un esquema general aproximado basado en operadores de un cuerpo, que vamos ahora a desarrollar.

El teorema de Wick permite calcular en forma explícita el valor medio, y por lo tanto el correspondiente operador efectivo (I.4.9), de un operador fermiónico arbitrario \hat{P} de n cuerpos respecto de un operador estadístico general de c.i. y en el conjunto gran canónico. El operador efectivo \hat{p} es denominado en

este contexto operador efectivo de campo medio, y es un operador de un cuerpo,

$$\begin{aligned}\hat{P} &= \sum_{i,j} \left[\frac{\partial \langle \hat{P} \rangle}{\partial A_{ij}} c_i^+ c_j + \frac{\partial \langle \hat{P} \rangle}{\partial B_{ij}} c_i c_j + \frac{\partial \langle \hat{P} \rangle}{\partial B_{ij}^*} c_j^+ c_i^+ \right] \\ &= \frac{1}{2} Z^+ P Z + \frac{1}{2} \text{tr}[R],\end{aligned}\quad (\text{II.5.1})$$

donde

$$P = \begin{bmatrix} R & -\Delta^* \\ \Delta & -R^* \end{bmatrix}, \quad (\text{II.5.2})$$

con

$$R_{ij} = \frac{\partial \langle \hat{P} \rangle}{\partial \langle c_i^+ c_j \rangle} = R_{ij}^*, \quad (\text{II.5.3a})$$

$$\frac{1}{2} \Delta_{ij} = \frac{\partial \langle \hat{P} \rangle}{\partial \langle c_i c_j \rangle} = -\frac{1}{2} \Delta_{ji}^*. \quad (\text{II.5.3b})$$

Supongamos entonces que se dispone del conocimiento de m valores medios de operadores fermiónicos arbitrarios \hat{P}_i , $i=1, \dots, m$. En virtud de (I.4.8) el operador estadístico en la aproximación de campo medio será de la forma

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \exp\{\lambda_o + \sum_{i=1}^m \beta_i \hat{P}_i\} \\ &= \exp\{\lambda_o^* + \frac{1}{2} Z^+ Q Z\},\end{aligned}\quad (\text{II.5.4})$$

con

$$\begin{aligned}Q &= \sum_{i=1}^m \beta_i P_i = \sum_{i=1}^m \beta_i \begin{bmatrix} R_i & -\Delta_i^* \\ \Delta_i & -R_i^* \end{bmatrix} \\ &\equiv \begin{bmatrix} R & -\Delta^* \\ \Delta & -R^* \end{bmatrix},\end{aligned}\quad (\text{II.5.5})$$

donde R_i , Δ_i son las matrices análogas a (II.5.3) para el operador

\hat{P}_i . Mediante una transformación de Bogoliubov apropiada podemos llevar (II.5.4) a la forma diagonal

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 + \sum_i \lambda_i c_i^+ c_i\} . \quad (\text{II.5.6})$$

No obstante, a diferencia del operador (II.2.1), los operadores (II.5.4) y (II.5.6) son no lineales, pues ahora tanto R como Δ dependen de la matriz densidad de un cuerpo D , la que a su vez depende de $\hat{\rho}$. Para parámetros β_i fijos, la relación (II.2.15) se convierte en el presente contexto en la ecuación matricial no lineal

$$D = [\exp\{-Q(D)\} + I']^{-1} , \quad (\text{II.5.7})$$

que determina la matriz densidad de un cuerpo D . El sistema (II.5.7) constituye la expresión matricial de las ecuaciones estadísticas generalizadas de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB), y puede resolverse iterativamente de la manera bosquejada en I.4, partiendo de una matriz inicial D^0 :

$$\begin{aligned} Q^i &= Q(D^i) , \\ D^{i+1} &= [I' + \exp\{-Q^i\}]^{-1} . \end{aligned} \quad (\text{II.5.8})$$

El proceso iterativo debe continuarse hasta alcanzar la convergencia en todos los elementos de D . La evaluación de (II.5.8) requiere la diagonalización de la matriz Q en cada paso:

$$D^{i+1} = (W^i)^+ [\exp(-Q'^i) + I']^{-1} W^i , \quad (\text{II.5.9a})$$

$$Q^i (W^i)^+ = (W^i)^+ Q'^i , \quad (\text{II.5.9b})$$

siendo Q^i la matriz de autovalores del i -ésimo paso y W^i la correspondiente matriz unitaria de autovectores. En forma más explícita, las ecuaciones (II.5.9) equivalen a

$$\begin{pmatrix} R^i & -\Delta^{i*} \\ \Delta^i & -R^{i*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_j^i \\ V_j^i \end{pmatrix} = \lambda_j^i \begin{pmatrix} U_j^i \\ V_j^i \end{pmatrix}, \quad (\text{II.5.10a})$$

$$f_j^{i+1} = [1 + \exp(-\lambda_j^i)]^{-1}, \quad (\text{II.5.10b})$$

donde $\begin{pmatrix} U_j^i \\ V_j^i \end{pmatrix}$ denota la j -ésima columna de $(W^i)^+$. La condición de autoconsistencia exige que a) los U y V producidos en iteraciones sucesivas sean los mismos y b) los f_j de dos iteraciones sucesivas coincidan. Cabe remarcar, que esta deducción, basada en el tratamiento general de la sección I.4, es más simple, compacta y general que la dada por ej., en la ref. 6, basada en la termodinámica convencional. El formalismo puede extenderse a otros conjuntos estadísticos, cambiando solamente la relación entre los autovalores de D y Q .

Si \hat{P} es un operador de n cuerpos, las matrices R , Δ (II.5.3) son polinomios de grado $(n-1)$ en A_{ij} y B_{ij} , B_{ij}^* . Por ej., para un operador de la forma

$$\begin{aligned} \hat{P} &= \hat{T} + \hat{V} \\ &= \sum_{i,j} T_{ij} c_i^+ c_j + \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} c_i^+ c_j^+ c_l c_k, \end{aligned} \quad (\text{II.5.11})$$

donde $T_{ij} = T_{ji}^*$, y $V_{ijkl} = -V_{ijlk} = V_{klij}^*$, se obtiene utilizando (II.1.31),

$$\langle \hat{P} \rangle = \sum_{i,j} T_{ij} A_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} (A_{ki} A_{lj} + \frac{1}{2} B_{kl} B_{ij}^*). \quad (\text{II.5.12})$$

Por lo tanto,

$$R_{ij} = T_{ij} + \sum_{k,l} V_{ikjl} A_{lk}, \quad (II.5.13)$$

$$\Delta_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k,l} V_{klji} B_{kl}^*, \quad (II.5.14)$$

$$\hat{P} = \sum_{i,j} R_{ij} c_i^+ c_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j} (\Delta_{ij} c_i c_j + \Delta_{ij}^* c_j^+ c_i^+), \quad (II.5.15)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{P} \rangle &= \text{tr}[(T + \frac{1}{2}(R-T))A + \frac{1}{2} \Delta B] \\ &= \langle \hat{T} \rangle + \frac{1}{2} \langle \hat{V} \rangle. \end{aligned} \quad (II.5.16)$$

donde $\hat{v} = \hat{p} - \hat{T}$, es el operador efectivo correspondiente a \hat{V} . El factor $\frac{1}{2}$ en el último renglón de (II.5.16) se debe a que la interacción es de dos cuerpos. En general, si \hat{V} es un operador de n cuerpos, se obtiene la relación $\langle \hat{v} \rangle = n \langle \hat{V} \rangle$.

En situaciones donde $\langle c_i c_j \rangle = 0$, Δ se anula, y el formalismo se reduce a Hartree-Fock estadístico generalizado, reduciéndose el sistema (II.5.10) a la mitad de dimensión. Esto ocurre necesariamente en tratamientos canónicos. Cuando se emplea el conjunto gran canónico, la necesidad de incluir contracciones $B \neq 0$ depende de la importancia de estos términos en el valor medio de los operadores \hat{P}_i .

La solución de la ecuación (II.5.7) da entonces como resultado la matriz D óptima que ajusta los valores medios disponibles (sean de un cuerpo o no), maximizando a la vez la entropía de p.i.. Para valores fijos de los β_i , las ecuaciones siempre poseen solución, aunque ésta puede no ser única. El método iterativo puede ofrecer dificultad cuando existen varias

soluciones posibles simultáneas, especialmente en los puntos críticos, donde dos o más soluciones dan como resultado la misma entropía. En este caso, el número de iteraciones puede diverger.

El método alternativo consiste en minimizar directamente la energía libre generalizada (I.4.16). Como parámetros variacionales pueden utilizarse directamente los elementos de la matriz D . Es conveniente utilizar la relación $D = WD^+W^+$ y utilizar entonces los números de ocupación f_j y los elementos de W . En el caso puro, sólo subsiste obviamente la minimización respecto de W . Notemos que utilizando para la entropía la expresión (II.1.16), se obtiene

$$\frac{\partial S}{\partial f_j} = \ln[(1+f_j)/f_j] . \quad (\text{II.5.17})$$

Por lo tanto, la minimización de F (I.4.16) conduce directamente a

$$f_j = [1 + \exp(+\epsilon_j/T)]^{-1} , \quad (\text{II.5.18})$$

$$0 = \frac{\partial \langle \hat{P}'_1 \rangle}{\partial W_{ij}} , \quad (\text{II.5.19})$$

con

$$\epsilon_j = \frac{\partial \langle \hat{P}'_1 \rangle}{\partial f_j} = -\lambda_j T , \quad (\text{II.5.20})$$

donde $\hat{P}'_1 = \hat{P}_1 - \sum_{i=2}^m \mu_i \hat{P}_i$. (II.5.18-19) equivalen a

$$\frac{\partial \langle \hat{P}'_1 \rangle}{\partial \langle c'_i c'_j \rangle} = \delta_{ij} \epsilon_j , \quad (\text{II.5.21})$$

$$\frac{\partial \langle \hat{P}'_1 \rangle}{\partial \langle c'_i c'_j \rangle} = 0 . \quad (\text{II.5.22})$$

Las cantidades ϵ_j constituyen los autovalores del operador de campo medio correspondiente a \hat{P}_1 . A diferencia del caso puro, la minimización determina completamente a W , salvo degeneración accidental de los λ_j .

El calor específico generalizado adquiere la expresión

$$\frac{\partial \langle \hat{P}_1 \rangle}{\partial T_1} = T_1 \sum_j \frac{\partial S}{\partial f_j} \frac{\partial f_j}{\partial T_1}, \quad (\text{II.5.23})$$

y no coincide en general con $(\langle \hat{P}_1^2 \rangle - \langle \hat{P}_1 \rangle^2)/T_1^2$. Finalmente, notemos que si clasificamos los observables por el número de cuerpos, obtenemos la siguiente expresión alternativa para la entropía de c.i.,

$$S = -\lambda_0 - \sum_i \beta_i n_i P_i, \quad (\text{II.5.24})$$

donde n_i es el número de cuerpos del operador \hat{P}_i . Utilizando (II.5.24) se obtiene, en lugar de la expresión exacta (I.3.5),

$$\frac{\partial \lambda_0}{\partial \beta_j} = -n_j P_j - \sum_i \beta_i (n_i - 1) \frac{\partial P_i}{\partial \beta_j}, \quad (\text{II.5.25})$$

donde se observa claramente que sólo coincide con la expresión exacta si $n_i = 1 \forall i$.

En el caso usual de equilibrio termodinámico, el exponente del operador estadístico lo forman \hat{H} y el operador número de partículas \hat{N} (si se trabaja en el conjunto gran canónico). Por lo tanto,

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 - \beta(\hat{h} - \mu \hat{N})\}, \quad (\text{II.5.26})$$

donde \hat{h} es el hamiltoniano efectivo de campo medio, construido en

forma análoga a (II.5.1), β la inversa de la temperatura, y μ el potencial químico. El sistema (II.5.7) se reduce a

$$D = [\exp\{h'(D)\} - I']^{-1}, \quad (\text{II.5.27})$$

con

$$h'(D) = h(D) - \mu \Pi, \quad (\text{II.5.28})$$

donde $\hat{h} = \frac{1}{2} Z^\dagger h(D) Z + \frac{1}{2} \text{tr}[h^{11}]$, y $\hat{N} = \frac{1}{2} Z^\dagger \Pi Z + \frac{1}{2} \text{tr}[\Pi]$ (Π es la matriz (II.3.35)). Las matrices R y Δ correspondientes a \hat{h} se denotan a veces por h^{11} y h^{20} , llamándose Δ el potencial de apareamiento y h^{11} el hamiltoniano de Hartree-Fock. La aproximación es llamada en este caso de Hartree-Fock-Bogoliubov térmico (HFBT)^{6,8}. Si Δ se anula, el método se reduce a Hartree Fock térmico (HFT)⁵, y finalmente, si la contribución de la interacción (de dos o más cuerpos) presente en \hat{H} a h^{11} es nula y $h^{20} \neq 0$, el método es el de BCS térmico (BCST)⁶. En todos los casos, la aproximación autoconsistente proporciona una cota superior (para multiplicadores fijos y $T > 0$) al gran potencial

$$\Omega = \langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle - TS. \quad (\text{II.5.29})$$

Si se incluye en el exponente además de \hat{N} un término de impulso angular, el formalismo es el de 'Cranking HFBT'⁹.

El hecho de poder extender en forma simple el formalismo de p.i. (HFT) a uno general de cuasipartícula independiente (HFBT), es de gran importancia, pues permite tratar interacciones de corto alcance, en cuyos desarrollos multipolares, los términos de apareamiento poseen una fundamental relevancia. No obstante, las fluctuaciones del número de partículas, ya presentes por el hecho de trabajar en el conjunto gran canónico, aumentan por efecto de

la transformación (II.2.8), que no conmuta con \hat{N} (véase para más detalles el Cap. III).

No obstante, conviene volver a remarcar que el presente formalismo es completamente general, pudiéndose utilizar para cualquier tipo de operadores fermiónicos \hat{P}_i de los cuales se posean datos, no siendo necesario que conmuten con \hat{H} . El operador \hat{P}_i puede evolucionar en el tiempo, y no corresponder a una situación de equilibrio. El formalismo describe en un instante dado, un sistema arbitrario en base a operadores generales de un cuerpo, maximizando la entropía.

Si en lugar de partir de parámetros β_i determinados, se dispone directamente de los valores medios $\langle \hat{P}_i \rangle$, no siempre existirá un operador densidad de c.i. capaz de ajustar los valores medios requeridos. Se define la correlación como la diferencia entre el valor medio exacto de un operador y el valor medio inferido por medio del teorema de Wick,

$$C_P = \langle \hat{P} \rangle_{ex} - \langle \hat{P} \rangle_{c.i.} . \quad (II.5.30)$$

Para que exista una solución aproximada de partícula o cuasipartícula independiente, la información disponible debe ser tal que no implique una correlación no nula.

II.6 LA APROXIMACION ESTADISTICA GENERALIZADA DE CAMPO MEDIO EN SISTEMAS BOSONICOS

Extenderemos en esta sección el formalismo anterior al caso bosónico. El teorema de Wick sigue siendo válido para la evaluación de valores medios de operadores de n cuerpos en el conjunto gran canónico, aunque si se incluyen términos lineales en b , b^+ , en el exponente de $\hat{\rho}$, existen ahora contracciones $\langle b^+ \rangle$, $\langle b \rangle$ no nulas. En lugar de (II.1.31), se obtiene (véase Ap. C)

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\hat{\rho} x_1 x_2 x_3 x_4] &= \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle \langle x_3 \rangle \langle x_4 \rangle \\ &+ \sum_{i < j, k < l} \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle \langle :x_k :: x_l: \rangle + \langle :x_1 :: x_2 :: x_3 :: x_4: \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.6.1})$$

donde k, l , denotan índices distintos a i, j , y $:x_i: = x_i - \langle x_i \rangle$, siendo válido para el valor medio de operadores normales $:x_i:$ la expresión (II.1.31).

El operador de campo medio más general será de la forma

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \sum_{i,j} [R_{ij} b_i^+ b_j + \frac{1}{2} (\Delta_{ij} b_i b_j + \Delta_{ij}^* b_i^+ b_j^+)] + \sum_i (G_i b_i^+ + G_i^* b_i) \\ &= \frac{1}{2} (Z^+ P Z + Z^+ G + G^+ Z) - \frac{1}{2} \text{tr}[R] \\ &= \frac{1}{2} (Z'^+ P Z') - \frac{1}{2} G^+ (P^{-1})^+ G - \frac{1}{2} \text{tr}[R] , \end{aligned} \quad (\text{II.6.2a})$$

donde

$$P = \begin{bmatrix} R & \Delta^* \\ \Delta & R^* \end{bmatrix} , \quad (\text{II.6.2b})$$

con

$$R_{ij} = \frac{\partial \langle \hat{P} \rangle}{\partial A_{ij}} = R_{ij}^* , \quad (\text{II.6.3a})$$

$$\frac{1}{2} A_{ij} = \frac{\partial \langle \hat{P} \rangle}{\partial B_{ij}} = \frac{1}{2} A_{ji}^* \quad (\text{II.6.3b})$$

$$G_i = \frac{\partial \langle \hat{P} \rangle}{\partial \langle b_i^+ \rangle} , \quad (\text{II.6.3c})$$

$$Z^c = Z - T ,$$

$$T = -P^{-1}G = \langle Z \rangle . \quad (\text{II.6.4})$$

La relación (II.6.4) implica automáticamente $\frac{\partial \langle \hat{P} \rangle}{\partial \langle Z^c \rangle} = 0$. Si la información disponible consta de los valores medios de n operadores bosónicos arbitrarios \hat{P}_i , $i=1, \dots, n$, el operador densidad en la aproximación de campo medio será de la forma

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \exp\{\lambda_0 + \sum_i \beta_i \hat{P}_i\} \\ &= \exp\{\lambda_0' + \frac{1}{2} Z^+ Q Z + Z^+ G + Z G^+\} \\ &= \exp\{\lambda_0^c + \frac{1}{2} Z^c Q Z^c\} , \end{aligned} \quad (\text{II.6.5})$$

donde $Q = \sum_i \beta_i P_i$, $G = \sum_i \beta_i G_i$. La relación entre multiplicadores y valores medios está dada por el sistema no lineal matricial

$$D^c \Pi = [\exp\{\Pi Q(D^c, T)\} - I']^{-1} , \quad (\text{II.6.6a})$$

$$T = -Q^{-1}(D^c, T)G , \quad (\text{II.6.6b})$$

donde tanto G como Q dependen de la dispersión D^c y la traslación T , a través de (II.6.3). Partiendo de valores medios iniciales

$(D^c)^0$, T^0 , se obtiene la relación recursiva

$$(D^c)^{i+1} \Pi = [\exp(\Pi Q^i) - I]^{-1}, \quad (\text{II.6.7a})$$

$$T^{i+1} = -(Q^i)^{-1} G^i, \quad (\text{II.6.7b})$$

es decir,

$$\Pi Q^i W^i = W^i Q'^i,$$

$$(D^c)^{i+1} \Pi = W [\exp(\Pi Q'^i) - I]^{-1} (W^i)^{-1}, \quad (\text{II.6.8})$$

donde Q'^i es la matriz de autovalores del i -ésimo paso y W^i la correspondiente matriz de autovectores. El sistema (II.6.8) equivale a

$$\begin{pmatrix} R^i & \Delta^{i*} \\ -\Delta^i & -R^{i*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_j^i \\ Y_j^i \end{pmatrix} = \lambda_j^i \begin{pmatrix} X_j^i \\ Y_j^i \end{pmatrix} \quad (\text{II.6.9a})$$

$$f_j^{i+1} = [\exp(-\lambda_j^i) - 1]^{-1}, \quad (\text{II.6.9b})$$

donde $\begin{pmatrix} X_j^i \\ Y_j^i \end{pmatrix}$ denota la j -ésima columna de (W^i) .

La condición de autoconsistencia exige que en dos iteraciones sucesivas tanto los vectores X , Y , los números medios de ocupación f_j y las traslaciones T coincidan. Al igual que en el caso fermiónico, se puede optar por la minimización directa de la energía libre generalizada. Se analiza en el Cap. IV un ejemplo específico.

APENDICE A

TRANSFORMACIONES Y OPERADORES DE UN CUERPO EN SISTEMAS FERMIONICOS

a) Transformaciones lineales de un cuerpo

La transformación (lineal) más general entre operadores de creación y aniquilación fermiónicos es de la forma^{10,9}

$$\begin{pmatrix} c' \\ c'^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V \\ V^* & U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}, \quad (\text{II.A.1})$$

donde $\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}$ es el vector de operadores Z definido en (II.2.3) y U , V , matrices de $L \times L$ (L es el número de estados de una partícula linealmente independientes). La matriz

$$W = \begin{pmatrix} U & V \\ V^* & U^* \end{pmatrix}, \quad (\text{II.A.2})$$

debe ser unitaria para que los operadores primados satisfagan nuevamente las relaciones (II.1.2). Esto implica $WW^+ = W^+W = I$, o,

$$\begin{aligned} UU^+ + VV^+ &= I, \\ UV^{tr} + VU^{tr} &= 0, \\ U^+V + V^{tr}U^* &= 0, \\ U^+U + V^{tr}V^* &= I. \end{aligned} \quad (\text{II.A.3})$$

El teorema de Bloch-Messiah¹¹ permite descomponer una matriz unitaria de la forma (II.A.2) como producto de tres matrices unitarias de forma determinada:

$$W = \begin{pmatrix} F & 0 \\ 0 & F^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{U} & \bar{V} \\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G & 0 \\ 0 & G^* \end{pmatrix}, \quad (\text{II.A.4a})$$

o sea,

$$U = F \bar{U} G, \quad V = F \bar{V} G^*, \quad (\text{II.A.4b})$$

donde F y G son matrices unitarias y \bar{U} , \bar{V} , matrices reales de la forma

$$\bar{U} = \begin{bmatrix} 0 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & u_1 & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & u_n & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}, \quad \bar{V} = \begin{bmatrix} 0 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & v_1 & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & v_n & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{II.A.5})$$

con

$$u_i = \begin{bmatrix} u_i & 0 \\ 0 & u_i \end{bmatrix}, \quad v_i = \begin{bmatrix} 0 & v_i \\ -v_i & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{II.A.6})$$

donde los números u_i , v_i satisfacen $u_i^2 + v_i^2 = 1$. La demostración se basa en el hecho de que por medio de una transformación unitaria, toda matriz hermitica puede ser diagonalizada, y toda matriz antisimétrica descompuesta en bloques reales de 2×2 similares a v_i .

Escribiendo (II.A.1) explícitamente, se obtiene

$$c'_j = \sum_i [u_{ji} c_i + v_{ji} c_i^+], \quad (\text{II.A.7})$$

y la fórmula adjunta para $c_j'^+$. Utilizando la unitariedad de W se obtiene la relación inversa

$$c_i = \sum_j [u_{ji}^* c'_j + v_{ji} c_j'^+]. \quad (\text{II.A.8})$$

El teorema de Bloch Messiah permite entender la transformación (II.A.7) como la composición de tres transformaciones:

i) Una transformación unitaria de los operadores c_i^+ ,
(transformación de Hartree-Fock):

$$c_j^1 = \sum_i G_{ji} c_i \quad (II.A.9a)$$

Los operadores c_j^1 forman la llamada base canónica.

ii) Una transformación especial de Bogoliubov (transformación de BCS¹²) para los estados 'apareados' (\bar{i}, i) , definidos por los bloques de 2x2 en (II.A.5),

$$c_i^2 = u_i c_i^1 + v_i c_{\bar{i}}^{1+}, \quad (II.A.9b)$$

$$c_{\bar{i}}^2 = u_i c_{\bar{i}}^1 - v_i c_i^{1+},$$

y una transformación del tipo

$$c_j^2 = c_j^{1+}, \quad c_1^2 = c_1^1, \quad (II.A.9c)$$

para los estados 'bloqueados', donde $v_j=1$, $u_j=0$, y $v_1=0$, $u_1=1$.

iii) Finalmente una transformación unitaria de los operadores c_i^2 :

$$c_j' = \sum_i F_{ji} c_i^2 \quad (II.A.9d)$$

La transformación de Bogoliubov (II.A.1) es por lo tanto una transformación de BCS en una base apropiada.

Para los fines de las secciones (II.1-3), existe una indeterminación en la definición de los operadores c_i' , pues siempre es posible efectuar una transformación del tipo $c_i' = c_i'^+$, que conduce a $\lambda_i' = -\lambda_i$, $f_i' = 1-f_i$. No se pierde el carácter diagonal de $\ln(\hat{\rho})$ y sólo se redefinen los estados $|i\rangle$, creando el operador $c_i'^+$ un agujero (hole) respecto del operador $c_i'^+$ (de ahí

el cambio en el número de ocupación). Si existen además autovalores λ_i degenerados, es posible realizar una transformación unitaria arbitraria dentro de cada espacio propio. Por ej., en el caso puro ($f_i=0,1$), es posible efectuar una transformación del tipo (II.A.9d) arbitraria entre los estados ocupados y otra similar entre los desocupados, sin que se modifique el operador densidad.

b) Conexión entre los estados de vacío:

Los operadores $c_j'^+$ crean estados de una cuasipartícula $|j'\rangle = c_j'^+ |0'\rangle$, donde $|0'\rangle$ es el vacío de los operadores primados ($c_j' |0'\rangle = 0$). Si $\bar{V} = 0$, $|0'\rangle$ coincide con el vacío de los operadores c_i y el estado $|j\rangle$ es una combinación lineal de los estados $|i\rangle = c_i^+ |0\rangle$: $|j'\rangle = \sum_i U_{ji} |i\rangle$.

Si $\bar{V} \neq 0$, los vacíos difieren. La relación entre ambos está dada por el teorema de Thouless^{13,9},

$$|0'\rangle = \langle 0|0'\rangle \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} Q_{ij} c_i^+ c_j^+\right\} |0\rangle, \quad (\text{II.A.10})$$

con (véase (II.A.3))

$$\begin{aligned} Q &= -U^{-1}V = -V^{\text{tr}} (U^{-1})^{\text{tr}} \\ &= -Q^{\text{tr}}, \end{aligned} \quad (\text{II.A.11})$$

$$\begin{aligned} \langle 0|0'\rangle &= (\det(U))^{(1/2)} \\ &= \left[\exp\left\{\frac{1}{2} \text{tr}[\ln(U)]\right\}\right]. \end{aligned} \quad (\text{II.A.12})$$

La relación (II.A.10) es válida si $\langle 0|0'\rangle \neq 0$, es decir, si U tiene inverso. En la base canónica (II.A.9a), (II.A.10) puede reescribirse en la forma

$$\begin{aligned}
|0'\rangle &= \left[\prod_{i>0} u_i \right] \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_i (v_i/u_i) c_i^{1+} c_i^{1+} \right\} |0\rangle \\
&= \prod_{i>0} [u_i - v_i c_i^{1+} c_i^{1+}] |0\rangle .
\end{aligned}
\tag{II.A.13}$$

$|0'\rangle$ es entonces un estado de BCS en la base canónica. Thouless dió el teorema originariamente para Determinantes de Slater (D.S.), los cuales pueden ser considerados como vacíos de operadores fermiónicos apropiados (II.A.9c). En este caso, los estados de dos cuasipartículas son estados de partícula agujero, y podemos reescribir (II.A.10) como

$$|\psi'\rangle = \langle \psi | \psi' \rangle \exp \left\{ \sum_{j,m} Q_{mj} c_m^+ c_j \right\} |\psi\rangle , \tag{II.A.14}$$

donde $|\psi\rangle = \prod_j c_j^+ |0\rangle$ (j (m) denota estados ocupados (no ocupados)) y $|\psi'\rangle$ un D.S. no ortogonal a $|\psi\rangle$.

Vacíos (o D.S.) $|0'\rangle$ ortogonales a $|0\rangle$ ocurren si \bar{U} posee elementos nulos en la diagonal. En este caso (II.A.10) se generaliza a

$$|0'\rangle = \left[\prod_j c_j^{1+} \right] \left[\prod_{i>0} u_i \right] \exp \left\{ \sum_{i>0} (v_i/u_i) c_i^+ c_i^+ \right\} |0\rangle , \tag{II.A.15}$$

con $u_i \neq 0$, y donde la productoria sobre j corre sobre los estados 'bloqueados' con $u_j=0$, $v_j=1$.

La transformación $\exp\{\hat{Q}\} |0\rangle$ ($\hat{Q} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} Q_{ij} c_i^+ c_j^+$) no es unitaria pues cambia la norma del estado. Los vacíos pueden vincularse también a través de una transformación unitaria¹⁴,

$$|0'\rangle = \exp\{\hat{T}\} |0\rangle , \tag{II.A.16}$$

donde \hat{T} es un operador hermitico de un cuerpo,

$$\hat{T} = \sum_{k,k'} T_{kk'} c_k^+ c_{k'}^+ + \text{h.c.} \quad (\text{II.A.17})$$

el cual vincula además a los operadores c y c' :

$$c_i'^+ = \exp\{\hat{T}\} c_i^+ \exp\{-\hat{T}\} . \quad (\text{II.A.18})$$

(II.A.16) es válida aún cuando $\langle 0|0' \rangle = 0$. Notemos que $|0' \rangle$ es independiente de la transformación (II.9.d). Por lo tanto, a los fines de vincular ambos vacíos, podemos suponer $F^+ = G$. En este caso, la relación entre las matrices T y Q viene dada por las fórmulas^{15,9}

$$T = iRS^{-1} , \quad Q = -tg(R)S^{-1} , \quad (\text{II.A.19})$$

donde

$$R = F\bar{R}F^+ , \quad S = F^*\bar{S}F^+ , \quad (\text{II.A.20})$$

siendo \bar{R} la matriz diagonal de elementos r_k tal que $u_k = \cos(r_k)$, $v_k = -\sin(r_k)$, ($0 \leq r_k \leq \pi/2$), y \bar{S} una matriz con elementos diagonales 0 y 1 y bloques de 2×2 similares a V_i (II.A.6) con $v_i=1$. De este modo,

$$\bar{U} = \cos(\bar{R}) , \quad \bar{V} = \sin(\bar{R})\bar{S}^+ , \quad (\text{II.A.21})$$

$$U = \cos(R) , \quad V = \sin(R)S^+ .$$

La matriz S es unitaria, mientras que R y F son hermiticas.

c) Operadores de un cuerpo

Todo operador de un cuerpo fermiónico puede escribirse en la forma

$$\begin{aligned} \hat{O} &= \sum_{i,j} [A_{ij} c_i^+ c_j + \frac{1}{2} (B_{ij} c_i c_j + C_{ij} c_i^+ c_j^+)] \\ &= \frac{1}{2} Z^+ M Z + \frac{1}{2} \text{tr}[A] , \end{aligned} \quad (\text{II.A.22})$$

donde

$$M = \begin{pmatrix} A & C \\ B & -A^{tr} \end{pmatrix}, \quad (II.A.23)$$

con B y C matrices antisimétricas (de LxL). Si \hat{O} es hermítico, M debe ser hermítica, lo que implica A hermítica y $C = -B^*$. Bajo una transformación de Bogoliubov (II.A.1), \hat{O} se reescribe en la forma

$$\hat{O} = \frac{1}{2} Z'^+ M' Z' + \frac{1}{2} \text{tr}[A], \quad (II.A.22)$$

con

$$M' = WMW^+. \quad (II.A.23)$$

Para M hermítica el desarrollo explícito de lo anterior conduce a

$$A' = UAU^+ - UB^*V^+ + VBU^+ - VA^*V^+, \quad (II.A.24)$$

$$B' = V^*AU^+ - V^*B^*V^+ + U^*BU^+ - U^*A^*V^+.$$

En este caso, M es diagonalizable por medio de una transformación unitaria W, de modo que es siempre posible encontrar U y V tales que $A'_{ij} = \lambda'_i \delta_{ij}$, $B'_{ij} = 0$. Los autovalores de M son de la forma $\pm \lambda'_i$, con autovectores $\begin{pmatrix} x_i \\ y_i^* \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} y_i \\ x_i^* \end{pmatrix}$ respectivamente.

Existe en realidad un isomorfismo entre los operadores de un cuerpo fermiónicos y las matrices que lo representan. Por ej., si $\hat{O}_1 = \frac{1}{2}Z^+ M_1 Z$, $\hat{O}_2 = \frac{1}{2}Z^+ M_2 Z$, entonces

$$[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = \frac{1}{2}Z^+ M_3 Z, \quad (II.A.25)$$

con

$$M_3 = [M_1, M_2]. \quad (II.A.26)$$

El conmutador de dos operadores de un cuerpo es pues otro

operador de un cuerpo, y la matriz que lo representa es el conmutador de las matrices originales. Si $B_i = C_i = 0$, (II.A.26) se reduce directamente a

$$A_g = [A_1, A_2] , \quad (II.A.27)$$

con $\hat{O}_i = c^+ A_i c$. Los operadores de un cuerpo cierran pues un álgebra bajo la operación de conmutación. El álgebra de Lie generada por todos los operadores elementales \hat{A}_{ij} (II.1.1a) que conservan el número de partículas, corresponde al grupo $U(n)$ (grupo de matrices unitarias de $n \times n$), donde $n = L$ es el número total de operadores de destrucción c_i linealmente independientes, existiendo n^2 generadores $c_i^+ c_j$ independientes¹⁶. En caso de incluirse los operadores \hat{B}_{ij} (II.1.1b), el grupo correspondiente es $R(2n)$ (grupo de rotaciones en $2n$ dimensiones), existiendo en total $n^2 + n(n-1)$ operadores de un cuerpo independientes. Subconjuntos de determinados operadores pueden formar subálgebras particulares.

APENDICE B

TRANSFORMACIONES Y OPERADORES DE UN CUERPO EN SISTEMAS BOSONICOS

a) Transformaciones generales lineales.

En el caso bosónico, la transformación (lineal) más general entre operadores de creación b^+ y aniquilación b es de la forma^{9,10}

$$\begin{pmatrix} b' \\ b'^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X & Y \\ Y^* & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ b^+ \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d \\ d^* \end{pmatrix}, \quad (\text{II.B.1})$$

donde $\begin{pmatrix} b' \\ b'^+ \end{pmatrix}$ es el vector Z (II.3.26). Nuevamente, si existen L estados bosónicos de una partícula linealmente independientes, las matrices X e Y son de $L \times L$, y d de $L \times 1$. Existen dos diferencias sustanciales con el caso fermiónico. En primer lugar, es posible sumar un término constante en la transformación lineal. En segundo lugar, la matriz

$$W = \begin{pmatrix} X & Y \\ Y^* & X^* \end{pmatrix}, \quad (\text{II.B.2})$$

debe ser unitaria pero respecto de la métrica

$$\Pi = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad (\text{II.B.3})$$

para que los operadores primados sigan cumpliendo las relaciones de conmutación (II.3.2). Esto implica

$$W^+ \Pi W = W \Pi W^+ = \Pi, \quad (\text{II.B.4})$$

y,

$$\begin{aligned}
XX^+ - YY^+ &= I, \\
XY^{tr} - YX^{tr} &= 0, \\
X^+X - Y^{tr}Y^* &= I, \\
X^+Y - Y^{tr}X^* &= 0.
\end{aligned}
\tag{II.B.5}$$

$$W^{-1} = \Pi W^+ \Pi = \begin{bmatrix} X^+ - Y^{tr} & \\ -Y^+ & X^{tr} \end{bmatrix}. \tag{II.B.6}$$

El teorema de Bloch Messiah para bosones permite descomponer a W en forma similar al caso fermiónico:

$$W = \begin{bmatrix} F & 0 \\ 0 & F^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{X} & \bar{Y} \\ \bar{X} & \bar{Y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G & 0 \\ 0 & G^* \end{bmatrix}, \tag{II.B.7}$$

donde F y G son matrices unitarias y \bar{X} , \bar{Y} matrices diagonales reales de elementos x_k , y_k (positivos) que satisfacen $x_k^2 - y_k^2 = 1$.

Escribiendo (II.B.1) explícitamente se obtiene

$$b'_j = \sum_i [X_{ji} b_i + Y_{ji} b_i^+] + d_j, \tag{II.B.8}$$

y utilizando (II.B.6) se obtiene la relación inversa

$$b_i = \sum_j [X_{ji}^* b'_j - Y_{ji}^* b_j'^+] + d_i', \tag{II.B.9}$$

donde

$$\begin{bmatrix} d' \\ d'^* \end{bmatrix} = -W^{-1} \begin{bmatrix} d \\ d^* \end{bmatrix}. \tag{II.B.10}$$

En la representación de coordenadas e impulsos (II.3.57), la transformación (II.B.1) equivale a la transformación canónica

$$\begin{bmatrix} \hat{Q}' \\ \hat{P}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Re}(X+Y) & \text{Im}(Y-X) \\ \text{Im}(X+Y) & \text{Re}(X-Y) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{Q} \\ \hat{P} \end{bmatrix} + (2)^{1/2} \begin{bmatrix} \text{Re}(d) \\ \text{Im}(d) \end{bmatrix}. \tag{II.B.11}$$

b) Conexión entre los estados de vacío.

El vacío de los operadores primados $|0'\rangle$ (definido por la condición $b_i' |0'\rangle = 0$, $\forall i$), difiere de $|0\rangle$ si $Y \neq 0$, al igual que en el caso fermiónico. Consideremos primero el caso en que el vector d es nulo. La conexión entre los estados de vacío esta dada por el teorema de Thouless para bosones⁹,

$$|0'\rangle = \langle 0|0'\rangle \exp\left\{\frac{1}{2}\sum_{i,j} Q_{ij} b_i^+ b_j^+\right\} |0\rangle, \quad (II.B.12)$$

donde

$$\begin{aligned} Q &= -X^{-1}Y = -Y^{\text{tr}}(X^{-1})^{\text{tr}} \\ &= Q^{\text{tr}}, \end{aligned} \quad (II.B.13)$$

$$\begin{aligned} \langle 0|0'\rangle &= [\det(X)]^{(-1/2)} \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{2}\text{Tr}[\ln(X)]\right\}. \end{aligned}$$

En el caso bosónico, (II.B.12) es siempre válida ya que los vacíos de operadores conectados por una transformación de Bogoliubov nunca son ortogonales. A diferencia del caso fermiónico, es imposible considerar al estado $[\prod_i b_i^+] |0\rangle$ como vacío de nuevos operadores bosónicos.

Si la matriz W es nula, pero existe en cambio una traslación d no nula, el vacío también se modifica, y se expresa como un estado coherente^{9,17}

$$|0'\rangle = \langle 0|0'\rangle \exp\left\{-\sum_i d_i b_i^+\right\} |0\rangle, \quad (II.B.14)$$

con

$$\langle 0|0'\rangle = \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_i |d_i|^2\right\}. \quad (II.B.15)$$

Finalmente, la relación general puede obtenerse combinando

los resultados (II.B.11-15):

$$|0'\rangle = \langle 0|0'\rangle \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_{i,j} Q_{ij} b_i^+ b_j^+ + \sum_i b_i^+ (d_i' - \sum_j Q_{ij} d_j'^*)\right\}, \quad (\text{II.B.16})$$

donde

$$\langle 0|0'\rangle = [\det(X)]^{(-1/2)} \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_i |d_i'|^2 + \sum_{i,j} Q_{ij} d_i' d_j'^*\right\}. \quad (\text{II.B.17})$$

La relación entre vacíos puede obtenerse también por medio de una transformación unitaria⁹,

$$|0'\rangle = \exp(\hat{T}) |0\rangle, \quad (\text{II.B.18})$$

con

$$\hat{T} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} T_{ij} b_i^+ b_j^+ + \text{h.c.} . \quad (\text{II.B.19})$$

Definiendo una matriz diagonal \bar{R} de elementos r_k , tales que $\sinh(r_k) = y_k$, y suponiendo $F = G^+$, se obtiene

$$\begin{aligned} T &= -iRS^{-1}, \\ Q &= \tanh(R)S^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{II.B.20})$$

con

$$R = F\bar{R}F^+, \quad S = F^*F^+. \quad (\text{II.B.21})$$

La relación (II.B.18) es válida si $d = 0$. Para traslaciones, podemos escribir, en lugar de (II.B.14),

$$|0'\rangle = \exp(\hat{S}) |0\rangle, \quad (\text{II.B.22})$$

donde el operador hermítico \hat{S} es

$$\hat{S} = i \sum_j [d_j b_j^+ - d_j^* b_j] = \sum_j [-p_j \hat{Q}_j + q_j \hat{P}_j], \quad (\text{II.B.23})$$

$$\exp\{-i\hat{S}\}\hat{Q}_j\exp\{i\hat{S}\} = \hat{Q}_j + q_j = \hat{Q}'_j, \quad (\text{II.B.24})$$

$$\exp\{-i\hat{S}\}\hat{P}_j\exp\{i\hat{S}\} = \hat{P}_j + p_j = \hat{P}'_j, \quad (\text{II.B.25})$$

donde $q_j = (2)^{1/2}\text{Re}(d_j)$, $p_j = (2)^{1/2}\text{Im}(d_j)$. Notemos que $|0'\rangle$ es un estado coherente pues

$$\begin{aligned} b_i |0'\rangle &= (b'_i - d_i) |0\rangle \\ &= -d_i |0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{II.B.26})$$

El nuevo vacío es un autoestado del operador aniquilación original, siendo el correspondiente autovalor $-d_i$. Los estados $|d_i\rangle \equiv |0'\rangle$ conforman la llamada representación de Bargmann¹⁸ (compleja) del correspondiente espacio de Hilbert, y constituyen estados fundamentales de osciladores armónicos desplazados (centrados en (q_j, p_j)) en la representación de coordenadas. Son por consiguiente, estados de mínima incerteza.

c) Operadores generales de un cuerpo.

Todo operador hermitico cuadrático en los operadores bosónicos (y por ende en las coordenadas e impulsos) puede escribirse en la forma

$$\hat{O} = \frac{1}{2} [Z^+ M Z + F^+ Z + Z^+ G] + K, \quad (\text{II.B.27})$$

donde

$$\begin{aligned} M &= \begin{pmatrix} A & C \\ B & A^{tr} \end{pmatrix}, \\ F &= \begin{pmatrix} f \\ g^* \end{pmatrix}, \\ G &= \begin{pmatrix} g \\ f^* \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{II.B.28})$$

y K una constante. Si \hat{O} es hermítico, la matriz M debe ser hermítica, lo que implica A hermítica, $B = C^*$, $F = G^*$ (o sea $f=g^*$) y K real. Bajo una transformación general de Bogoliubov (II.B.1), \hat{O} puede reescribirse en la forma

$$\hat{O} = \frac{1}{2} [Z'^{\dagger} M' Z' + F'^{\dagger} Z' + Z'^{\dagger} G'] + K' , \quad (\text{II.B.29})$$

donde

$$\begin{aligned} M' &= U^{\dagger} M U , \\ F'^{\dagger} &= F^{\dagger} U + T^{\dagger} M , \\ G' &= U^{\dagger} G + M T , \\ K' &= \frac{1}{2} [T^{\dagger} M T + F^{\dagger} T + T^{\dagger} G] + K , \end{aligned} \quad (\text{II.B.30})$$

con $U = W^{-1}$, $T = \begin{pmatrix} d' \\ d'^{*} \end{pmatrix}$. Escribiendo las componentes de M' explícitamente, se obtiene para M hermítico,

$$\begin{aligned} A' &= X A X^{\dagger} - X B^* Y^{\dagger} - Y B X^{\dagger} + Y A^* Y^{\dagger} , \\ B' &= -Y^* A X^{\dagger} + Y^* B^* Y^{\dagger} + X^* B X^{\dagger} - X^* A^* Y^{\dagger} . \end{aligned} \quad (\text{II.B.31})$$

El conmutador de dos operadores de un cuerpo bosónicos de la forma (II.B.29) es nuevamente un operador de un cuerpo. Al igual que en el caso fermiónico, las propiedades de conmutación pueden expresarse en términos de las matrices que los representan. Si $\hat{O}_1 = \frac{1}{2} Z^{\dagger} M_1 Z$, $\hat{O}_2 = \frac{1}{2} Z^{\dagger} M_2 Z$, $\hat{O}_3 = F^{\dagger} Z$, $\hat{O}_4 = Z^{\dagger} G$, entonces

$$\begin{aligned} [\hat{O}_1, \hat{O}_2] &= \frac{1}{2} Z^{\dagger} M_3 Z , \\ M_3 &= M_1 \Pi M_2 - M_2 \Pi M_1 , \end{aligned} \quad (\text{II.B.32})$$

$$\begin{aligned}
[\hat{O}_3, \hat{O}_4] &= F^+ \Pi G, \\
[\hat{O}_1, \hat{O}_4] &= Z^+ M \Pi G, \\
[\hat{O}_3, \hat{O}_1] &= (F^+ \Pi M) Z.
\end{aligned}
\tag{II.B.33}$$

Si $B = 0$, $F = G = 0$, el operador (II.B.29) conserva el número de bosones presentes. En este caso, $\hat{O}_i = b_i^+ A_i b$, $[\hat{O}_i, \hat{O}_j] = b_i^+ [A_i, A_j] b$, expresión idéntica al caso fermiónico (véase (II.A.27)), por lo que el álgebra de Lie generada es nuevamente $U(n)$, para n operadores b_i , b_i^+ , linealmente independientes¹⁶. No obstante, si se incluyen operadores con $B \neq 0$ (es decir, operadores elementales \hat{B}_{ij}), la relación (II.B.32) implica el grupo simpléctico $S_p(2n)$ ¹⁶. Este grupo es no compacto (sus representaciones irreducibles no poseen dimensión finita) y corresponde al hecho de que no existe un límite superior para el número de bosones aún para un número finito de estados de una partícula. El número total de generadores independientes es $n^2 + n(n+1)$, agregándose al caso fermiónico los $2n$ operadores b_i^2 , b_i^{+2} .

En contraste con el caso fermiónico, no es siempre posible llevar el operador \hat{O} (II.B.29) con M hermítica, a la forma diagonal

$$\hat{O} = \sum_j \lambda_j b_j'^+ b_j' + D,
\tag{II.B.34}$$

es decir, $M'_{ij} = \lambda_j \delta_{ij}$, $F = 0$ ($D = K' + \frac{1}{2} \sum_j \lambda_j$), por medio de una transformación de Bogoliubov (II.B.1). En primer lugar, para eliminar los términos lineales se requiere que la matriz M sea invertible ($T = -M^{-1}G$). En segundo lugar, los operadores bosónicos

primados quedan determinados junto con la matriz W por la condición $[\hat{O}, b'_j] = \lambda_j b'^{\dagger}_j$ lo cual conduce al sistema⁹

$$MU = \Pi U \Pi M', \quad (\text{II.B.35})$$

o, denotando la i -ésima columna de U por $U_i = \begin{pmatrix} X^+ \\ -Y^+ \end{pmatrix}_i$,

$$\begin{pmatrix} A & B^* \\ B & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^+ \\ -Y^+ \end{pmatrix}_i = \lambda_i \begin{pmatrix} X^+ \\ Y^+ \end{pmatrix}_i, \quad (\text{II.B.36})$$

que equivale a diagonalizar la matriz no hermitica ΠM ($\Pi M U = U \Pi M'$). Los autovalores de ΠM son de la forma $\pm \lambda_i$, con autovectores $\begin{pmatrix} X^+ \\ -Y^+ \end{pmatrix}_i$, $\begin{pmatrix} -Y^{tr} \\ X^{tr} \end{pmatrix}_i$ respectivamente.

No obstante, la matriz ΠM puede poseer autovalores complejos. En este caso es fácil mostrar que el correspondiente autovector U_i tiene norma nula: $U_i^\dagger M U_i = \lambda_i U_i^\dagger \Pi U_i = (U_i^\dagger M U_i)^\dagger = \lambda_i^* U_i^\dagger \Pi U_i$. Si λ_i no es real, entonces $\lambda_i \neq \lambda_i^*$ y por consiguiente se anula la norma $U_i^\dagger \Pi U_i$ y además el coeficiente $M'_i = U_i^\dagger M U_i$. Por lo tanto, no es posible llevar \hat{O} a la forma (II.B.34), y no existe el correspondiente bosón b'_j . Puede mostrarse que si los autovalores de la matriz M poseen todos el mismo signo (y son no nulos), entonces ΠM posee sólo autovalores reales¹⁰.

La norma también puede anularse si el autovalor λ_i es nulo. Para estudiar estos casos conviene escribir el sistema (II.B.36) en la representación de coordenadas e impulsos. Por conveniencia, definiremos éstos introduciendo la frecuencia y la masa directamente en la definición⁹:

$$\hat{Q}_j = (b_j' + b_j'^+) / (2M_j \lambda_j')^{(1/2)}, \quad (\text{II.B.37})$$

$$\hat{P}_j = -i(b_j' - b_j'^+) (M_j \lambda_j' / 2)^{(1/2)},$$

$$[\hat{Q}_j, \hat{P}_k] = i\delta_{kj}. \quad (\text{II.B.38})$$

La masa M_j es por el momento arbitraria. Si no existen autovalores complejos o nulos, podemos reescribir \hat{O} en la forma

$$\hat{O} = \sum_j \frac{1}{2} \{ \hat{P}_j'^2 / M_j + M_j \lambda_j'^2 \hat{Q}_j'^2 \} + K'. \quad (\text{II.B.39})$$

Los operadores \hat{P}' , \hat{Q}' cumplen entonces las relaciones

$$[\hat{O}, \hat{P}_j'] = i M_j \lambda_j'^2 \hat{Q}_j' \quad (\text{II.B.40})$$

$$[\hat{O}, \hat{Q}_j'] = -i \hat{P}_j' / M_j,$$

lo cual conduce al sistema combinado

$$\begin{pmatrix} A & B^* \\ B & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P \\ -P^* \end{pmatrix}_j = i \lambda_j'^2 M_j \begin{pmatrix} Q \\ Q^* \end{pmatrix}_j, \quad (\text{II.B.41a})$$

$$\begin{pmatrix} A & B^* \\ B & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q \\ -Q^* \end{pmatrix}_j = (-i / M_j) \begin{pmatrix} P \\ P^* \end{pmatrix}_j, \quad (\text{II.B.41b})$$

donde las matrices P, Q se definen en la forma

$$\begin{aligned} Q_{jk} &= (X_{kj}^* + Y_{kj}) / (2M_j \lambda_j')^{(1/2)}, \\ P_{jk} &= -i(Y_{kj} - X_{kj}^*) (M_j \lambda_j' / 2)^{(1/2)}, \end{aligned} \quad (\text{II.B.42})$$

de modo que (II.B.1) puede reescribirse como

$$\begin{aligned}\hat{Q}_j' &= \sum_i \{Q_{ij} b_i^+ + Q_{ij}^* b_i\} , \\ \hat{P}_j' &= \sum_i \{P_{ij} b_i^+ + P_{ij}^* b_i\} .\end{aligned}\tag{II.B.43}$$

La condición (II.B.38) implica

$$(P^* \ P)_j \begin{bmatrix} Q \\ Q^* \end{bmatrix}_k = -i\delta_{jk} ,\tag{II.B.44}$$

lo cual determina el parámetro M_j para normalización fija de \hat{P}' y \hat{Q}' , o la normalización de estos vectores para M_j fijo.

La ventaja de las ecuaciones (II.B.41) es que aún en los casos en que el autovector posee norma nula, es posible construir operadores \hat{P}_j' , \hat{Q}_j' con las propiedades anteriores. Así, si existe un λ_j imaginario puro, \hat{O} puede aún escribirse en la forma (II.B.39), con una componente igual a

$$\frac{1}{2} \{ \hat{P}_j'^2 / M - M_j |\lambda_j|^2 \hat{Q}_j'^2 \} = -\frac{1}{2} |\lambda_j| \{ (b_j'^+)^2 + b_j'^2 \},\tag{II.B.45}$$

donde el operador bosónico se define a partir de (II.B.37), usando el módulo de λ_j .

Otro caso interesante es aquel en que $\lambda_j = 0$. Las ecuaciones (II.B.41) determinan la correspondiente coordenada e impulso. La (II.B.41a) asegura que la inhomogeneidad $\begin{bmatrix} P \\ P^* \end{bmatrix}_j$ es ortogonal al modo 0, $\begin{bmatrix} P \\ -P^* \end{bmatrix}_j$. El operador \hat{O} puede escribirse nuevamente en la forma (II.B.39) pero con una componente igual a $\hat{P}_j'^2 / (2M_j)$, la cual posee un espectro de partícula libre.

APENDICE C

TEOREMA DE WICK PARA SISTEMAS ESTADISTICOS

Daremos a continuación la generalización estadística⁴ del conocido teorema de reordenamiento normal, definido usualmente respecto de un estado puro^{3,5}. Para un operador densidad general de c.i. $\hat{\rho}$ (II.2.1) o (II.3.25), la contracción de dos operadores x, y , que representan indistintamente un operador de creación a^+ o aniquilación a , es directamente el valor medio

$$\langle xy \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho} xy] . \quad (\text{II.C.1})$$

El orden normal de un producto de dos operadores, denotado por $:xy:$ se define de modo que sea nulo su valor medio:

$$:xy: = xy - \langle xy \rangle . \quad (\text{II.C.2})$$

Para un producto de n operadores, $n > 2$, el orden normal se define recursivamente, de modo que se satisfaga el Teorema de Wick²⁰. Este establece que el producto de n operadores u, v, w, \dots, x, y, z , es igual al orden normal del producto, mas el orden normal de $n-2$ operadores por una contracción (en todas las formas posibles), mas el orden normal de $n-4$ operadores por dos contracciones, siguiendo así hasta llegar a la suma de todas las posibles contracciones. De este modo,

$$\begin{aligned} uvw\dots xyz &= :uvw\dots xyz: + \langle uv \rangle :w\dots xyz: + \langle vw \rangle :u\dots xyz: + \dots \\ &\quad + \langle uv \rangle \langle yz \rangle :w\dots x: + \langle uw \rangle \langle xz \rangle :v\dots y: + \dots \\ &\quad \dots \quad (\text{II.C.3}) \\ &\quad + \langle uv \rangle \dots \langle wx \rangle :yz: + \langle uv \rangle \dots \langle wz \rangle :xy: + \dots \\ &\quad + \langle uv \rangle \langle wx \rangle \dots \langle yz \rangle + \langle ux \rangle \langle vw \rangle \dots \langle yz \rangle + \dots . \end{aligned}$$

En el caso fermiónico, se debe tener en cuenta que al extraer una contracción de un producto de operadores, se debe agregar un signo menos si el número de permutaciones necesarias es impar. Por ej., para un operador de dos cuerpos se obtiene

$$\begin{aligned} a_i^+ a_j^+ a_k a_l &= :a_i^+ a_j^+ a_k a_l: + \\ &\langle a_i^+ a_j^+ \rangle :a_k a_l: + :a_i^+ a_j^+ \langle a_k a_l \rangle + \\ &\langle a_i^+ a_l \rangle :a_j^+ a_k: + \langle a_j^+ a_k \rangle :a_i^+ a_l: \mp :a_i^+ a_k \langle a_j^+ a_l \rangle \mp :a_j^+ a_l \langle a_i^+ a_k \rangle \\ &+ \langle a_i^+ a_j^+ \rangle \langle a_k a_l \rangle \mp \langle a_i^+ a_k \rangle \langle a_j^+ a_l \rangle + \langle a_i^+ a_l \rangle \langle a_j^+ a_k \rangle . \quad (\text{II.C.4}) \end{aligned}$$

donde el signo - (+) corresponde a fermiones (bosones).

El valor medio del operador $uv\dots yz$ o $a_i^+ a_j^+ a_k a_l$, en un conjunto estadístico del tipo gran canónico y respecto de un operador densidad de c.i. es igual a la suma que aparece en el último renglón de (II.C.3) o (II.C.4) respectivamente, es decir, igual a la suma de todas las posibles contracciones²¹. Para un operador de n cuerpos, el número total de términos en la suma es de $(2n)!/(2^n n!)$. En otros conjuntos estadísticos la propiedad anterior deja de ser válida y queda sujeta a restricciones (ver por. ej., cap.III, secc. 8 y cap. VI). Por otro lado, el valor medio de un producto normal es siempre nulo:

$$\langle :uv\dots yz: \rangle = 0 . \quad (\text{II.C.5})$$

Además, puede probarse que el valor medio de un producto de productos normales es igual a la suma de todas las contracciones que involucren operadores de productos diferentes, sin incluir las contracciones dentro de un mismo producto normal. Por ej.:

$$\langle :uv::xy: \rangle = \langle uy \rangle \langle vx \rangle \mp \langle ux \rangle \langle vy \rangle , \quad (\text{II.C.6a})$$

$$\langle :uvwz::xy: \rangle = 0 , \quad (\text{II.C.6b})$$

donde nuevamente el signo - (+) corresponde a fermiones (bosones). Las relaciones (II.C.6) implican que en el valor medio de $:st:uv\dots yz$ sólo influye el anteúltimo renglón de (II.C.3). Esta parte coincide a menos de una constante, con el operador efectivo de campo medio

$$\begin{aligned} \hat{O} &= \sum_{i,j} \frac{\partial \langle x_1 \dots x_n \rangle}{\partial \langle x_i x_j \rangle} x_i x_j \\ &= \sum_{i,j} \frac{\partial \langle x_1 \dots x_n \rangle}{\partial \langle x_i x_j \rangle} :x_i x_j: + (n/2) \langle x_1 \dots x_n \rangle . \end{aligned} \quad (\text{II.C.7})$$

Por ej., en (II.C.4) el operador efectivo lo forman los renglones 2° y 3°. De este modo, $\langle \hat{O} \rangle = (n/2) \langle \hat{O} \rangle$, donde $n/2$ es el orden (número de cuerpos) del operador $\hat{O} = x_1 \dots x_n$.

Hasta aquí hemos supuesto que el valor medio del producto de un número impar de operadores es nulo. No obstante, en el caso de un sistema bosónico, pueden existir contracciones 'anómalas' $\langle x \rangle \neq 0$, aún respecto de un operador de c.i.. En estos casos conviene expresar x en términos del operador 'centrado' o normal $x' = :x: = x - \langle x \rangle$, $\langle x' \rangle = 0$. Para un producto de operadores x', \dots, y' , todas las fórmulas anteriores siguen siendo válidas. Por ej.,

$$\begin{aligned} xy &= x'y' + x'\langle y \rangle + y'\langle x \rangle + \langle x \rangle \langle y \rangle \\ &= :x'y': + \langle x'y' \rangle + :x:\langle y \rangle + :y:\langle x \rangle + \langle x \rangle \langle y \rangle , \end{aligned} \quad (\text{II.C.8})$$

donde

$$\langle x'y' \rangle = \langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle , \quad (\text{II.C.9})$$

es la 'covarianza' o dispersión del valor medio de xy .

Referencias:

1. R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. C (en prensa).
2. R. Rossignoli and A. Plastino, a publicarse.
3. P. Ring and P. Schuck, 'The Nuclear Many-Body Problem' (Springer Verlag, N.Y., 1980).
4. H. Reinhardt, R. Balian and Y. Alhassid, Nucl. Phys. A 413, 475 (1984).
5. D. J. Thouless, 'The Quantum Mechanics of Many-Body Systems' (Academic, N.Y., 1961).
6. A. L. Goodman, Nucl. Phys. A 352, 30 (1981).
7. F. Reif, 'Foundations of Statistical and Thermal Physics' (Mc. Graw-Hill, N.Y., 1965).
- A. Katz, 'Principles of Statistical Mechanics' (Freeman, San Francisco, 1967).
8. M. Brack and P. Quentin, Nucl. Phys. A 361, 35 (1981).
9. A. L. Goodman, Nucl. Phys. A 352, 45 (1981).
10. N. N. Bogoliubov, Sov. Phys. JETP 7, 41 (1958); Sov. Phys. Usp. 2, 236 (1959).
- J. G. Valatin, Phys. Rev. 122, 1012 (1961).
11. C. Bloch and D. Messiah, N. Phys. 39, 95 (1962).
12. J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 188, 1175 (1957).
13. D. J. Thouless, N. Phys. 21, 225 (1960).
14. P. Ring and P. Schuck, N. Phys. A 292, 20 (1977).
15. H. Hara and S. Iwasaki, N. Phys. A 332, 61 (1979).
- R. Balian and E. Brezin, Nuovo Cim. 64B, 37 (1969).

- 16 A. J. Lipkin, 'Lie Groups for Pedestrians' (North Holland, Amsterdam, 1966).
17. F. T. Arechi, E. Courtens, R. Gilmore and H. Thomas, Phys. Rev. A 6, 2211 (1972).
18. V. Bargmann, Rev. Mod. Phys. 34, 829 (1962).
19. D. J. Thouless, N. Phys. 22, 78 (1961).
20. G. C. Wick, Phys Rev. 80, 268 (1950).
21. M. Gaudin, N. Phys. 15, 89 (1960).

CAPITULO III

EFFECTOS TERMICOS Y COMPETENCIA ENTRE INTERACCIONES DE DISTINTO CARACTER

INTRODUCCION

Las descripciones térmicas y estadísticas de sistemas nucleares se han tornado frecuentes en la literatura durante la última década¹⁻⁴, fuertemente motivadas por la disponibilidad de información experimental concerniente a reacciones con iones pesados (véase por ej. Ref. 5). La complejidad del problema ha estimulado el estudio de modelos simples (como por ej. refs. 6,7), y desde el punto de vista teórico, el examen de las propiedades y peculiaridades de los hamiltonianos de pseudospín⁸⁻⁹ ha vertido mucha claridad sobre diversos aspectos del problema cuántico de muchos cuerpos. Estos modelos han probado ser extremadamente útiles en estudios teóricos sobre la validez de diversas aproximaciones¹⁰⁻¹².

El objeto de este capítulo es estudiar, dentro del marco de un modelo exactamente soluble, los efectos térmicos sobre la competencia entre dos de los más importantes ingredientes del problema nuclear de muchos cuerpos, superconductividad (originada en interacciones de corto alcance) y deformación (debido a fuerzas residuales de largo alcance). El capítulo está basado en los trabajos (13-15). Con este propósito, se propone una generalización apropiada del formalismo de las refs. 10,11, basado en la técnica de estados atómicos coherentes¹⁶, que permite aplicar este método a una extensión del modelo original de Lipkin⁸. Esta extensión¹⁷, basada en un álgebra de $SU(2) \times SU(2)$, es capaz de simular ciertos aspectos de la competencia entre interacciones de corto y largo alcance, y permite examinar efectos térmicos de una manera transparente.

De esta forma, las diversas aproximaciones de cuasipartícula independiente, pueden ser analizadas en detalle y ser comparadas con resultados exactos, para cualquier temperatura T , tanto en el límite termodinámico como en el caso de un número finito de partículas. También es posible analizar un operador estadístico general de p.i., y considerar distintos espacios de estados accesibles, dándose la posibilidad de un tratamiento estadístico en un conjunto de tipo canónico.

Finalmente, se analiza el problema de la determinación de fluctuaciones de diversos observables, a partir de las soluciones autoconsistentes de campo medio. Se obtienen importantes correcciones al teorema de Wick en las regiones críticas.

III.1 DESCRIPCION DEL MODELO

El modelo representa N fermiones distribuidos en dos niveles de p.i., cada uno con degeneración 2Ω , y separados por una energía ϵ . Los estados de p.i. pueden ser caracterizados en la forma $|p, \nu\rangle$, donde ν adopta los valores $+1$ (nivel superior) y -1 (nivel inferior), y $p = 1, \dots, 2\Omega$, identifica los estados dentro de cada nivel. En este contexto se introducen los operadores 'colectivos' de cuasispín⁸⁻⁹

$$\begin{aligned}\hat{J}_+ &= \sum_p c_{p+}^+ c_{p-} \\ &= \hat{J}_-^+, \end{aligned} \tag{III.1.1}$$

$$\hat{J}_z = \frac{1}{2} \sum_{p, \nu} \nu c_{p\nu}^+ c_{p\nu},$$

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_z^2 + \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+), \tag{III.1.2}$$

los cuales satisfacen un álgebra de $SU(2)$:

$$\begin{aligned}[\hat{J}_\nu, \hat{J}_z] &= -\nu \hat{J}_\nu, \\ [\hat{J}_+, \hat{J}_-] &= 2\hat{J}_z. \end{aligned} \tag{III.1.3}$$

El operador \hat{J}^2 conmuta con todos los operadores (III.1.1), y es por lo tanto el operador de Casimir del grupo. Denotaremos con M los autovalores de \hat{J}_z y $J(J+1)$ los de \hat{J}^2 , $|M| \leq J$, de la manera usual. Introduciremos a continuación los operadores¹⁷

$$\begin{aligned}\hat{Q}_+ &= \sum_p c_{p+}^+ c_{p-}^+ \\ &= \hat{Q}_-^+, \\ &\quad (III.1.4)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{Q}_z &= \frac{1}{2} \sum_{p,\nu} c_{p\nu}^+ c_{p\nu} \\ &= \frac{1}{2} \hat{N} - \Omega,\end{aligned}$$

$$\hat{Q}^2 = \hat{Q}_z^2 + \frac{1}{2} (\hat{Q}_+ \hat{Q}_- + \hat{Q}_- \hat{Q}_+), \quad (III.1.5)$$

llamados operadores de apareamiento de cuasispín. \hat{N} es el operador número de partículas. Los operadores (III.1.4) satisfacen nuevamente un álgebra de SU(2), y además, todo operador \hat{Q} conmuta con cualquier operador \hat{J} , conformando por consiguiente un álgebra de SU(2) x SU(2). \hat{Q}_+ (\hat{Q}_-) crea (destruye) dos partículas acopladas a $J = 0$. De este modo, los operadores \hat{Q} se comportan formalmente como los operadores de apareamiento de la teoría de superconductividad nuclear. Denotaremos con Q_0 los autovalores de \hat{Q}_z y $Q(Q+1)$ los de \hat{Q}^2 . Este modelo de Lipkin ampliado (SU(2) x SU(2)) posee una dimensión total¹⁹

$$D = \begin{bmatrix} 4\Omega \\ N \end{bmatrix}, \quad (III.1.6)$$

correspondiente a N partículas a ser distribuidas en 4Ω estados de p.i.. Los estados multiparticulares pueden ser caracterizados por los autovalores J, Q, M, Q_0 en la forma

$$|J, Q, M, Q_0\rangle = C(\hat{J}_+)^{J+M} (\hat{Q}_+)^{Q+Q_0} |J, Q, -J, -Q\rangle, \quad (III.1.7)$$

con

$$C = \{(J-M)!(Q-Q_0)!/[(2J)!(J+M)!(2Q)!(Q+Q_0)!]\}^{1/2} . \quad (\text{III.1.8})$$

De este modo, los estados (III.1.7) son ortonormales. No obstante, existe una simetría adicional a tener en cuenta, ya que todo operador \hat{J} o \hat{Q} conmuta con cualquiera de los $(2\Omega)!$ operadores de permutación que intercambian los índices p . Esta simetría adicional dará origen a una cierta multiplicidad $Y(J,Q)$ de un estado (III.1.7). Para caracterizar unívocamente al estado, es necesario añadir un número cuántico adicional α , $1 \leq \alpha \leq Y(J,Q)$, que identifica a los miembros de la representación irreducible del grupo de permutaciones $S_{2\Omega}$ al cual pertenece el estado (III.1.7). No obstante, dado que los hamiltonianos y observables a ser estudiados en este capítulo serán funciones sólo de los operadores (III.1.1) y (III.1.4), ninguna magnitud física dependerá de α .

En el apéndice A se demuestra que la multiplicidad mencionada es¹⁴

$$Y(J,Q) = \frac{(2\Omega+2)!(2\Omega)!(2J+1)(2Q+1)}{(\Omega+J+Q+2)!(\Omega+J-Q+1)!(\Omega-J+Q+1)!(\Omega-J-Q)!} , \quad (\text{III.1.9})$$

donde los valores de J y Q satisfacen las relaciones

$$\begin{aligned} \delta &\leq J \leq \Omega - |Q_0| , \\ |Q_0| &\leq Q \leq \Omega - \delta , \\ \delta + |Q_0| &\leq J + Q \leq \Omega . \end{aligned} \quad (\text{III.1.10})$$

δ denota la parte fraccionaria de $(N/2)$. Los rangos de variación dados por (III.1.10) generalizan tratamientos anteriores¹⁷ donde

sólo la 'banda' $(J+Q) = \Omega$ es considerada. Esto es en general suficiente para estudios realizados a $T=0$ concernientes al estado fundamental. Sin embargo, en tratamientos estadísticos los estados pertenecientes a otras bandas son accesibles, y deben ser incluidos en el correspondiente conjunto estadístico.

Q_0 queda determinado por el número de partículas presentes N . Los valores extremos $\pm \Omega$ corresponden a $N = 4\Omega$ (sistema saturado) y $N = 0$ (vacío) respectivamente. Para Q fijo, N puede fluctuar entre $2(\Omega-Q)$ y $2(\Omega+Q)$. Un concepto utilizado es el de senioridad de cuasispín¹⁷,

$$S = 2(\Omega - Q) , \quad (\text{III.1.11})$$

que indica el máximo número posible de partículas no apareadas compatibles con un valor dado de Q . El número real de partículas no apareadas depende además del índice α .

Si $J=\Omega$, $Q=0$, $|J,0,-J,0\rangle$ es simplemente el estado con 2Ω partículas situadas en el primer nivel. Los estados con J o Q máximos son completamente simétricos en el índice p y generan la correspondiente representación irreducible completamente simétrica. Además, $Y(J,Q) = 1$ sólo si $J = \Omega$ o $Q = \Omega$, por lo que son las únicas representaciones no degeneradas.

Las consideraciones generales de las secciones siguientes serán válidas para cualquier hamiltoniano que sea función de los operadores \hat{J} y \hat{Q} . No obstante, el hamiltoniano específico a ser estudiado es de la forma¹⁷

$$\hat{H} = \epsilon \hat{J}_z - \frac{1}{2} G \hat{Q}_+ \hat{Q}_- + \frac{1}{2} V (\hat{J}_+^2 + \hat{J}_-^2) , \quad (\text{III.1.12})$$

el cual conmuta con \hat{J}^2 , \hat{Q}^2 y \hat{Q}_0 . El primer término $\epsilon \hat{J}_z$ representa el hamiltoniano no perturbado. El segundo término representa una interacción de apareamiento entre estados separados por la energía ϵ , mientras que el tercero corresponde a una interacción monopolar, la cual simula una fuerza de largo alcance.

Si $V = 0$, \hat{H} conmuta además con \hat{J}_z . Sus autoestados son directamente los estados (III.1.7), con autovalores

$$E(J, Q, M, Q_0) = \epsilon M - \frac{1}{2} G [Q(Q+1) - Q_0(Q_0-1)] . \quad (\text{III.1.13})$$

Para $G=0$, el estado fundamental corresponde al estado con el máximo valor posible de J , con $M = -J$ y

$$E_0 = -\epsilon (\Omega - |Q_0|) , \quad (\text{III.1.14})$$

tomando Q el valor mínimo. Si $N = 2\Omega$ ($|Q_0| = 0$), se obtiene la energía más baja, y $J = \Omega$. Por el contrario, el término de apareamiento favorece estados con altos valores de Q (baja senioridad) y bajos valores de J . La energía del estado superconductor ($Q = \Omega$) está dada por

$$E_s = -\frac{1}{2} G [\Omega(\Omega+1) - Q_0(Q_0-1)] , \quad (\text{III.1.15})$$

donde hemos supuesto un número par de partículas. Este estado es el de energía más baja si

$$G > \frac{2(\Omega - |Q_0|)\epsilon}{\Omega(\Omega+1) - Q_0^2 - |Q_0|} \equiv G_c , \quad (\text{III.1.16})$$

Si $G < G_c$, el sistema prefiere el estado 'normal' (III.1.14). Estados 'intermedios' de la banda $J + Q = \Omega$, corresponden a estados excitados, al igual que aquellos con $J + Q < \Omega$. De este modo, el estado fundamental sufre una transición de fase (de primer orden) desde el estado normal al superconductor en $G = G_c$.

Si $G = 0$ y $V \neq 0$, el modelo se reduce al caso original de Lipkin⁸⁻⁹. La solución exacta se obtiene por diagonalización en el multiplete de dimensión $2J+1$ determinado por J , Q y Q_0 , no dependiendo los autovalores del valor de Q . El estado fundamental se encuentra siempre en la representación con el mayor valor posible de J , y su energía es independiente del signo de V , y más baja que la del estado normal (III.1.14). No se registran cambios abruptos en la solución al aumentar el valor de V , aunque en la zona alrededor de $V = \epsilon/N$, la derivada segunda de la energía fundamental respecto de V registra un máximo, al mismo tiempo que la energía del primer estado excitado se aproxima a la del fundamental y la componente con $M=-J$ deja de ser la principal en el estado fundamental. Estos cambios se hacen más notorios al aumentar N , existiendo en el límite termodinámico $\Omega \rightarrow \infty$ (y N proporcional a Ω) una transición de fase de segundo orden, como se verá más adelante.

Si ambas constantes de acoplamiento V y G son no nulas, los autovalores dependen además de Q y Q_0 . Las dos interacciones compiten entre sí, favoreciendo la fuerza de apareamiento estados con $J=0$, $Q=\Omega$, y la interacción monopolar aquellos con el máximo valor posible de J . El estado fundamental del sistema sufre una transición de fase desde el estado con J máximo al estado superconductor, para un valor de G más alto¹⁷ que en el caso $V=0$.

III.2 ENERGIAS LIBRES EXACTAS

Consideraremos en esta sección el cálculo de energías libres exactas de sistemas descritos por hamiltonianos que sean funciones de los operadores (III.1.1) y (III.1.4). El operador estadístico exacto en el conjunto canónico es

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 - \beta \hat{H}\} , \quad (\text{III.2.1})$$

donde β es la inversa de la temperatura T . La correspondiente energía libre exacta F (véase (I.2.12)) puede escribirse en la forma¹⁴

$$\begin{aligned} F &= T \lambda_0 = -T \ln\{\text{Tr}[\exp(-\beta \hat{H})]\} \\ &= -T \ln\left\{ \sum_{J,Q} Y(J,Q) \text{Tr}'[\exp(-\beta \hat{H})] \right\} , \quad (\text{III.2.2}) \end{aligned}$$

donde Tr' denota la traza sobre el subespacio de dimensión $2J+1$ caracterizado por valores fijos de J y Q . La traza en (III.2.2) ha sido tomada en el espacio completo de dimensión (III.1.6), siendo la suma en J y Q sobre los valores que satisfacen (III.1.10).

El límite termodinámico de (III.2.2) para $2\Omega \rightarrow \infty$, puede ser hallado analíticamente. Este tipo de límites ha sido estudiado en la ref.6, pero sólo con referencia a un modelo $SU(2)$, sin incluir términos de apareamiento. Es conveniente introducir las cantidades intensivas

$$\begin{aligned} q &= Q/2\Omega, \\ r &= J/2\Omega, \end{aligned} \quad (\text{III.2.3})$$

que pueden ser consideradas como variables continuas en el límite termodinámico, y sujetas a las restricciones (véase (III.1.10))

$$\begin{aligned} 0 \leq r \leq \frac{1}{2} - q_0, \\ q_0 \leq q \leq \frac{1}{2}, \\ q_0 \leq r + q \leq \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (\text{III.2.4})$$

donde $q_0 = |Q_0|/2\Omega$. Introduciendo las funciones ($\nu, \nu' = \pm 1$)

$$p_{\nu, \nu'}(r, q) = \left(\frac{1}{2} + \nu r + \nu' q\right), \quad (\text{III.2.5})$$

y utilizando la aproximación de Stirling para el factorial, es posible encontrar el límite intensivo de la multiplicidad,

$$s(r, q) = \lim_{2\Omega \rightarrow \infty} \frac{\ln[Y(J, Q)]}{2\Omega} = -\sum_{\nu, \nu'} p_{\nu, \nu'}(r, q) \ln\{p_{\nu, \nu'}(r, q)\}. \quad (\text{III.2.6})$$

Emplearemos a continuación el formalismo de estados atómicos coherentes (ver apéndice B). Para ello, utilizaremos la cota inferior de la desigualdad (III.B.15), que en el presente contexto se traduce a

$$\frac{1}{2J+1} \text{Tr}'[\exp(-\beta \hat{Q})] \geq \frac{1}{4\pi} \int \exp(-\beta \langle JQ\Omega' | \hat{H} | JQ\Omega' \rangle) d\Omega', \quad (\text{III.2.7})$$

donde $|J, Q, \Omega'\rangle$ es el estado atómico coherente (respecto de los operadores J) en el espacio extendido de $SU(2) \times SU(2)$ (omitiremos para abreviar el índice Q_0), y la integral es sobre toda la esfera de Bloch. Mediante (III.2.7), podemos escribir

$$F \leq -T \ln \left\{ \sum_{J, Q} Y(J, Q) \frac{2J+1}{4\pi} \int \exp[-\beta \langle JQ\Omega' | \hat{H} | JQ\Omega' \rangle] d\Omega' \right\}. \quad (\text{III.2.8})$$

En el límite termodinámico, la igualdad rige en (III.2.8) (ver apéndice B) para los términos de orden Ω , y las sumas sobre J y Q pueden reemplazarse por integrales sobre r y q , de modo que utilizando (III.2.6) se obtiene

$$\begin{aligned} f &= \lim_{2\Omega \rightarrow \infty} F/2\Omega \\ &= -T \lim_{2\Omega \rightarrow \infty} \left(\frac{\ln(I)}{2\Omega} \right), \end{aligned} \quad (\text{III.2.9})$$

donde

$$I = \frac{(2\Omega)^3}{4\pi} \int \exp\{-2\Omega\Phi(r, q, \Omega')\} d\Omega' r dr dq, \quad (\text{III.2.10})$$

$$\Phi(r, q, \Omega') = \langle JQ\Omega' | \hat{H}/2\Omega | JQ\Omega' \rangle - Ts(r, q). \quad (\text{III.2.11})$$

Para hallar el límite (III.2.9), es conveniente utilizar el método de Laplace. Para integrales del tipo

$$I(N) = \int \exp\{-NF(\vec{x})\} d\vec{x}, \quad (\text{III.2.12})$$

la contribución más grande a $I(N)$ proviene de la vecindad del punto donde $F(\vec{x})$ asume su valor mínimo. De esta manera, para N grande,

$$-\ln[I(N)]/N = \min F(\vec{x}) + O\left(\frac{\ln(N)}{N}\right). \quad (\text{III.2.13})$$

Por lo tanto, utilizando (III.2.13) se obtiene

$$f = \min_{r, q, \Omega'} \{h(r, q, \Omega') - Ts(r, q)\}, \quad (\text{III.2.14})$$

donde

$$h(r, q, \Omega') = \lim_{2\Omega \rightarrow \infty} \langle JQ\Omega' | \hat{H}/2\Omega | JQ\Omega' \rangle. \quad (\text{III.2.15})$$

Para Ω finito, los términos despreciados tanto en (III.2.6) como en (III.2.14) son de orden $\ln(\Omega)/\Omega$.

La obtención de $h(r,q,\Omega')$ no ofrece dificultad pues los operadores intensivos $\hat{j}_\zeta = \hat{J}_\zeta/2\Omega$ ($\zeta = x,y,z$) conmutan en el límite termodinámico, (por ej., $[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = \hat{j}_z/2\Omega$) y el valor medio de un producto de ellos es igual al producto de valores medios en este límite. Los términos despreciados en estas consideraciones son de orden $1/2\Omega$. El límite termodinámico constituye pues el límite clásico en este modelo.

De este modo, si $\Omega' = (\theta, \phi)$, se obtiene a partir de (II.B.2b),

$$\langle \hat{j}_z \rangle = -r \cos(\theta) , \quad (\text{III.2.16a})$$

$$\langle \hat{j}_\nu \rangle = r \sin(\theta) e^{i\nu\phi} , \quad (\text{III.2.16b})$$

$$\langle \hat{q}^2 \rangle = q^2 , \quad (\text{III.2.16c})$$

$$\langle \hat{q}_z \rangle = q_0 , \quad (\text{III.2.16d})$$

donde (III.2.16c) corresponde al límite termodinámico. Para el hamiltoniano (III.1.12) se obtiene en este límite,

$$h(r,q,\Omega') = -r \cos(\theta) + v r^2 \sin^2(\theta) - \frac{1}{2} g (q^2 - q_0^2) , \quad (\text{III.2.17})$$

donde

$$G = g/2\Omega , \quad (\text{III.2.18})$$

$$V = v/(2\Omega-1) .$$

Por consiguiente, para que el límite exista, las constantes de acoplamiento deben ser de la forma (III.2.18) con g y v finitos e independientes de Ω . (III.2.18) equivale a (III.B.17).

Se ha supuesto hasta ahora que la temperatura T es positiva. No obstante, en el presente modelo finito, la temperatura puede

obviamente ser negativa. En tal caso, se debe maximizar la expresión (III.2.14). El sistema parte para $T \rightarrow 0^-$ del estado de mayor energía.

Hasta aquí hemos considerado el conjunto canónico, pues la situación física real corresponde a un número fijo de partículas. En el conjunto gran canónico, debemos agregar el término $\mu \hat{N}$ en el exponente de $\hat{\rho}$ y extender la suma en (III.2.2) sobre Q_0 con $\Omega \leq Q_0 \leq \Omega$. El número total de estados accesibles es ahora

$$D' = \sum_{N=0}^{4\Omega} \left[\begin{matrix} 4\Omega \\ N \end{matrix} \right] = 2^{4\Omega} . \quad (\text{III.2.19})$$

Para obtener el límite termodinámico en este caso se deben utilizar estados coherentes respecto de J y Q , reemplazando de esta manera las sumas sobre M y Q_0 por integrales sobre ángulos sólidos Ω' y Ω'' . El resto del procedimiento es exactamente igual que en el caso anterior, obteniéndose, para el gran potencial intensivo

$$f' = \lim_{2\Omega \rightarrow \infty} \{ [\langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle - TS] / 2\Omega \} = \min_{r, q, \Omega', \Omega''} \{ h'(r, q, \Omega', \Omega'') - Ts(r, q) \}, \quad (\text{III.2.20})$$

donde

$$h'(r, q, \Omega', \Omega'') = \lim_{2\Omega \rightarrow \infty} \langle JQ\Omega'\Omega'' | (\hat{H} - \mu \hat{N}) / 2\Omega | JQ\Omega'\Omega'' \rangle. \quad (\text{III.2.21})$$

Las relaciones (III.2.16a-b) permanecen igual, pero las (III.2.16c-d) deben reemplazarse ahora por

$$\langle \hat{q}_z \rangle = -q \cos(\gamma), \quad (\text{III.2.22a})$$

$$\langle \hat{q}_\nu \rangle = q \sin(\gamma) e^{i\nu\psi}. \quad (\text{III.2.22b})$$

El estado $|JQ\Omega'\Omega''\rangle$ se construye en forma análoga a (III.B.2) e involucra una suma sobre estados con distinto número de partículas. No obstante los valores medios intensivos de operadores que conservan el número de partículas coinciden en ambos conjuntos en el límite termodinámico. Para ello se debe expresar γ en términos de $\langle \hat{q}_z \rangle$ a través de (III.2.22a). Por ej.,

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}_+ \hat{q}_- \rangle &= q^2 \sin^2 \gamma = q^2 (1 - \langle \hat{q}_z \rangle^2 / q^2) \\ &= q^2 - q_0^2 . \end{aligned} \quad (\text{III.2.23})$$

El último valor coincide con el proporcionado por las relaciones (III.2.16). Cabe destacar sin embargo que los valores medios de operadores que no conmutan con \hat{N} no coinciden en ambos conjuntos.

III.3 LA DESCRIPCION DE CUASIPARTICULA INDEPENDIENTE

El operador estadístico más general de cuasipartícula independiente que puede ser construido con los operadores colectivos (III.1.1,4) es de la forma

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \exp\{\lambda_0 + \lambda \hat{J}_z + \tau \hat{J}_+ + \tau^* \hat{J}_- + \sigma \hat{Q}_z + \eta \hat{Q}_+ + \eta^* \hat{Q}_-\} \\ &= \exp\{\lambda_0 + \frac{1}{2} \sum_p Z_p^+ M Z_p\} \quad , \quad (III.3.1)\end{aligned}$$

donde $Z_p^+ = (c_{p+}^+, c_{p-}^+, c_{p+}, c_{p-})$ y

$$M = \begin{bmatrix} (\lambda+\sigma)/2 & \tau & 0 & \eta \\ \tau^* & (\sigma-\lambda)/2 & -\eta & 0 \\ 0 & -\eta^* & -(\sigma+\lambda)/2 & -\tau^* \\ \eta^* & 0 & -\tau & (\lambda-\sigma)/2 \end{bmatrix} \quad . \quad (III.3.2)$$

El operador (III.3.1) es formalmente igual a un operador de rotación de $SU(2) \times SU(2)$ pero con 'ángulos sólidos' imaginarios. La diagonalización de la matriz M puede obtenerse en este caso por medio de dos transformaciones de Bogoliubov sucesivas (y conmutantes) de 2×2 ,

$$\begin{bmatrix} a_{p+}^+ \\ a_{p-}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\vartheta & -e^{i\phi} \sin\vartheta \\ e^{-i\phi} \sin\vartheta & \cos\vartheta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{p+}^+ \\ c_{p-}^+ \end{bmatrix} \quad , \quad (III.3.3)$$

$$\begin{bmatrix} c_{p+}'^+ \\ c_{p-}'^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\gamma & -e^{i\psi} \sin\gamma \\ e^{-i\psi} \sin\gamma & \cos\gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{p+}^+ \\ a_{p-}^+ \end{bmatrix} \quad . \quad (III.3.4)$$

La transformación (III.3.3) (de Hartree-Fock) deja invariante al operador $\hat{O}_1 = \sigma \hat{Q}_z + \eta \hat{Q}_+ + \eta^* \hat{Q}_-$, y permite escribir en forma diagonal a $\hat{O}_2 = \epsilon \hat{J}_z + \tau \hat{J}_+ + \tau^* \hat{J}_-$. La transformación (III.3.4) (de BCS) deja invariante a \hat{O}_2 y permite diagonalizar \hat{O}_1 . Los operadores de cuasispín primados son de la forma

$$\begin{aligned}\hat{J}'_z &= \hat{J}_z \cos(2\theta) - \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \sin(2\theta) e^{-i\phi} + \hat{J}_- \sin(2\theta) e^{i\phi}) , \\ \hat{J}'_+ &= \hat{J}_z \sin(2\theta) e^{i\phi} + \hat{J}_+ \cos^2(\theta) - \hat{J}_- e^{2i\phi} \sin^2(\theta) , \\ \hat{Q}'_z &= \hat{Q}_z \cos(2\gamma) - \frac{1}{2} (\hat{Q}_+ \sin(2\gamma) e^{-i\psi} + \hat{Q}_- \sin(2\gamma) e^{i\psi}) , \\ \hat{Q}'_+ &= \hat{Q}_z \sin(2\gamma) e^{i\psi} + \hat{Q}_+ \cos^2(\gamma) - \hat{Q}_- e^{2i\psi} \sin^2(\gamma) .\end{aligned}\tag{III.3.5}$$

De este modo, es posible escribir (III.3.1) en la forma diagonal

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \exp\{\lambda_0 + \lambda' \hat{J}'_z + \sigma' \hat{Q}'_z\} \\ &= \exp\{\lambda_0 - \sigma' \Omega + \sum_{p,\nu} \frac{1}{2} \epsilon_{\nu} c_{p\nu}^{\prime+} c_{p\nu}'\} ,\end{aligned}\tag{III.3.6}$$

donde $\epsilon_{\nu} = \lambda' \nu + \sigma'$, y λ' , σ' los autovalores de las matrices

$$M_1 = 2 \begin{bmatrix} \lambda/2 & \tau \\ \tau^* & -\lambda/2 \end{bmatrix} , \quad M_2 = 2 \begin{bmatrix} \sigma/2 & \eta \\ \eta^* & -\sigma/2 \end{bmatrix} , \text{ respectivamente,}$$

$$\begin{aligned}\lambda'^2 &= \lambda^2 + 4|\tau|^2 \\ \sigma'^2 &= \sigma^2 + 4|\eta|^2\end{aligned}\tag{III.3.7}$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned}\langle c_{p\nu}^{\prime+} c_{p'\nu'}' \rangle &= \delta_{pp'} \delta_{\nu\nu'} f_{\nu} , \\ \langle c_{p\nu}^{\prime+} c_{p'\nu'}^{\prime+} \rangle &= 0 ,\end{aligned}\tag{III.3.8}$$

donde

$$f_{\nu} = \{1 + \exp[-\frac{1}{2}(\lambda' \nu + \sigma')]\}^{-1}, \quad (\text{III.3.9})$$

habiéndose tomado la traza en el conjunto gran canónico. Utilizando (III.3.3-9) se obtiene,

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= \sigma' \Omega + 2\Omega \sum_{\nu} \ln(1 - f_{\nu}), \\ \lambda &= \lambda' \cos(2\theta), \\ \tau &= \frac{1}{2} \lambda' \sin(2\theta) e^{-i\phi}, \\ \sigma &= \sigma' \cos(2\gamma), \\ \eta &= \frac{1}{2} \sigma' \sin(2\gamma) e^{-i\psi}, \end{aligned} \quad (\text{III.3.10})$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}_z \rangle &= \langle \hat{J}'_z \rangle \cos(2\theta) = (\lambda/\lambda') \langle \hat{J}'_z \rangle, \\ \langle \hat{J}_+ \rangle &= -\langle \hat{J}'_z \rangle \sin(2\theta) e^{i\phi} = (2\tau^*/\lambda') \langle \hat{J}'_z \rangle, \\ \langle \hat{Q}_z \rangle &= \langle \hat{Q}'_z \rangle \cos(2\gamma) = (\sigma/\sigma') \langle \hat{Q}'_z \rangle, \\ \langle \hat{Q}_+ \rangle &= -\langle \hat{Q}'_z \rangle \sin(2\gamma) e^{i\psi} = (2\eta^*/\sigma') \langle \hat{Q}'_z \rangle, \end{aligned} \quad (\text{III.3.11})$$

donde

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}'_z \rangle &= 2\Omega(f_+ - f_-)/2, \\ \langle \hat{Q}'_z \rangle &= 2\Omega(f_+ + f_- - 1)/2. \end{aligned} \quad (\text{III.3.12})$$

El sistema exhibe en la descripción de c.i. tres fases bien definidas: a) Fase 'normal', caracterizada por $\langle \hat{J}'_z \rangle = \langle \hat{Q}'_z \rangle = 0$ (o sea, $\gamma = \theta = 0$); b) Fase 'deformada', con $\langle \hat{J}'_z \rangle \neq 0$, $\langle \hat{Q}'_z \rangle = 0$ ($\theta \neq 0$, $\gamma = 0$); c) Fase 'superconductora', con $\langle \hat{J}'_z \rangle = 0$, $\langle \hat{Q}'_z \rangle \neq 0$ ($\gamma \neq 0$, $\theta = 0$). Puede darse obviamente también el caso de una fase

'mixta' deformada superconductoramente.

Las relaciones explícitas (III.3.11) (equivalentes a (II.2.15)) establecen la 'proporcionalidad' entre cada valor medio y el conjugado del correspondiente multiplicador. De este modo, la inferencia estadística resulta trivial, anulándose el valor medio si se anula el correspondiente multiplicador. Para hallar la relación inversa, sólo es necesario expresar f_+ y f_- , o bien, $\langle \hat{J}_z' \rangle$ y $\langle \hat{Q}_z' \rangle$, en términos de los valores medios (III.3.11),

$$\begin{aligned}\langle \hat{J}_z' \rangle^2 &= \langle \hat{J}_z \rangle^2 + |\langle \hat{J}_+ \rangle|^2, \\ \langle \hat{Q}_z' \rangle^2 &= \langle \hat{Q}_z \rangle^2 + |\langle \hat{Q}_+ \rangle|^2.\end{aligned}\tag{III.3.13}$$

$\langle \hat{J}_z' \rangle$ y $\langle \hat{Q}_z' \rangle$ son pues iguales al valor medio clásico de los Casimires \hat{J}^2 y \hat{Q}^2 (es decir $\langle \hat{J}^2 \rangle = \langle \hat{J} \rangle \cdot \langle \hat{J} \rangle$). La entropía depende sólo de los escalares (III.3.13),

$$\begin{aligned}S &= -[\lambda_0 + \lambda' (\langle \hat{J}_z \rangle^2 + |\langle \hat{J}_+ \rangle|^2)^{1/2} + \sigma' (\langle \hat{Q}_z \rangle^2 + |\langle \hat{Q}_+ \rangle|^2)^{1/2}] \\ &= -2\Omega \sum_{\nu} [f_{\nu} \ln(f_{\nu}) + (1-f_{\nu}) \ln(1-f_{\nu})] .\end{aligned}\tag{III.3.14}$$

Cuanto menor sea el valor de los 'Casimires' (III.3.13), mayor será la entropía, llegando al valor máximo $S_m = 4\Omega \ln 2$ para $f_{\nu} = \frac{1}{2}$, o sea, $\langle \hat{J}_z' \rangle = \langle \hat{Q}_z' \rangle = 0$. Estados puros corresponden a $f_{\nu} = 0, 1$, es decir, $\langle \hat{J}_z' \rangle = \pm \Omega$, $\langle \hat{Q}_z' \rangle = 0$, o bien, $\langle \hat{J}_z' \rangle = 0$, $\langle \hat{Q}_z' \rangle = \pm \Omega$, en cuyo caso (véase (I.1.7)) $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$. El primer caso corresponde a

$$|\psi\rangle = \prod_{p=1}^{2\Omega} a_{p-}^+ |0\rangle .\tag{III.3.15}$$

El estado (III.3.15) coincide con el estado atómico coherente $|J, \Omega'\rangle$, con $J = \Omega$, $\Omega' = (\theta, \phi)$ y $N = 2\Omega$ (ver ap. B). El segundo corresponde a un estado de BCS con 0 o 4Ω cuasipartículas,

$$|\psi\rangle = \prod_{p=1}^{2\Omega} (\cos\gamma + e^{-i\psi} \sin\gamma a_{p+}^+ a_{p-}^+) |0\rangle, \quad (\text{III.3.16})$$

con $c_{p\nu}' |\psi\rangle = 0$. El estado (III.3.16) coincide con el estado coherente $|Q, \Omega'\rangle$, con $Q = \Omega$ y $\Omega' = (\gamma, \psi)$.

III.4 LA APROXIMACION DE CUASIPARTICULA INDEPENDIENTE Y LA EQUIVALENCIA EN EL LIMITE TERMODINAMICO

La aproximación térmica de campo medio consiste en este contexto en minimizar el gran potencial respecto de operadores estadísticos del tipo (III.3.1), y las ecuaciones resultantes son las de HFBT (ver sección II.5). El exponente de (II.3.1) coincide en este caso con el hamiltoniano efectivo de campo medio .

Utilizando los resultados de la sección anterior, y el teorema de Wick, puede calcularse el valor medio de cualquier operador función de los operadores \hat{J} y \hat{Q} respecto de (III.3.1). Para valores grandes de Ω , el término más importante del valor medio de un producto de m operadores \hat{J} , \hat{Q} , es el término directo, es decir, el producto de los valores medios. Su magnitud es de orden $(2\Omega)^m$, mientras que los términos restantes son de orden menor, $(2\Omega)^k$, $1 \leq k < m$. En el límite termodinámico, el valor medio intensivo, obtenido al dividir el valor medio total por $(2\Omega)^m$, será igual al término directo.

Con la sustitución

$$\begin{aligned} r &= - \langle \hat{J}_z^2 \rangle / 2\Omega = \frac{1}{2} (f_- - f_+) , \\ q &= - \langle \hat{Q}_z^2 \rangle / 2\Omega = \frac{1}{2} (1 - f_+ - f_-) , \end{aligned} \tag{III.4.1}$$

las fórmulas (III.3.11) coinciden exactamente con las (III.2.16a-b), (III.2.22), obtenidas con el formalismo de estados atómicos coherentes. Esto implica que valores medios de operadores de un cuerpo proporcionados por un estado puro coherente, pueden ser ajustados por un operador densidad de c.i. aunque de entropía

no necesariamente nula. Como se muestra en el Ap. B, los estados coherentes con $J = \Omega$ son exactamente igual a un D.S.. Los estados con $J < \Omega$ pueden ser simulados en cambio por un operador estadístico de p.i. construido con los operadores colectivos correspondientes. En forma similar, los estados con $Q = \Omega$ equivalen a un estado de BCS, mientras que aquellos con $Q < \Omega$ corresponden a operadores estadísticos de c.i.. Sólo los estados pertenecientes a representaciones irreducibles completamente simétricas corresponden a estados puros de c.i..

Los valores medios de operadores de m cuerpos respecto de estados $|J, Q, \Omega', \Omega''\rangle$ también coinciden con los proporcionados por (III.3.1) al efectuar la sustitución (III.4.1), en el límite termodinámico, debido a la preeminencia del término directo en este límite. Para operadores que conmutan con \hat{N} , también coincidirá su valor medio de p.i. con el tomado respecto al estado $|J, Q, \Omega', Q_0\rangle$. Esto implica por ej., que la energía por partícula del estado fundamental de hamiltonianos contruidos con los operadores \hat{J} , \hat{Q} , coinciden con los proporcionados por la aproximación de c.i. (HFB) en el límite termodinámico. No obstante, la descripción de p.i. no es necesariamente pura, existiendo la posibilidad de ocupación anormal ($f_\nu \neq 0, 1$) aún a $T = 0$.

Finalmente, es importante destacar que la expresión (III.2.6) para la entropía por partícula también coincide con la expresión de c.i. (III.3.14) al efectuar la sustitución (III.4.1). La expresión usual de c.i. para la entropía es pues el límite del factor de multiplicidad de la representación irreducible determinada por los f_ν , al identificar éstos con los Casimires intensivos por medio de (III.4.1).

Por consiguiente, la aproximación de HBFT (y en general, la descripción estadística de c.i.) provee la energía libre intensiva exacta (y valores medios intensivos exactos) en el límite termodinámico, para cualquier hamiltoniano función de \hat{J} y \hat{Q} , y equivale a la minimización (III.2.14). No obstante, no ocurre lo mismo con las fluctuaciones, las cuales dependen de los términos de orden $1/\Omega$ despreciados (véase sección III.10). Notemos que la sustitución (III.4.1) es siempre factible, dado que los f_i pueden ser confinados al intervalo $0 \leq f_+ + f_- \leq 1$ sin pérdida de generalidad, y elegir $f_- > f_+$, de modo que las restricciones (III.2.4) son nuevamente satisfechas.

III.5 LA SOLUCION DE BCS TERMICO

Consideraremos en esta sección específicamente el hamiltoniano (III.1.12) con $V = 0$. La interacción es puramente de apareamiento. Utilizando el teorema de Wick, la energía media y el número medio de partículas respecto de (III.3.1) son¹⁴

$$\begin{aligned}\langle \hat{H} \rangle &= 2\Omega \{ \epsilon \langle \hat{j}_z \rangle - \frac{1}{2}g [\langle \hat{q}_+ \rangle \langle \hat{q}_- \rangle + (\frac{1}{4}\langle \hat{n} \rangle^2 - \langle \hat{j}_z \rangle^2 - \langle \hat{j}_+ \rangle \langle \hat{j}_- \rangle) / (2\Omega)] \}, \\ &= 2\Omega \{ -\epsilon \cos(2\theta) - \frac{1}{2}g [q^2 \sin^2(2\gamma) + (\frac{1}{4}\langle \hat{n} \rangle^2 - \langle \hat{j}_z \rangle^2 - \langle \hat{j}_+ \rangle \langle \hat{j}_- \rangle) / (2\Omega)] \},\end{aligned}\quad (III.5.1)$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{N} \rangle &= 2\Omega(2\langle \hat{q}_z \rangle + 1) = 2\Omega(-2q \cos(2\gamma) + 1) \\ &= 2\Omega[f_- + f_+ + 2\sin^2(\gamma)(1 - f_+ - f_-)] ,\end{aligned}\quad (III.5.2)$$

donde $\hat{n} = \hat{N}/2\Omega$. Despejando γ de (III.5.2),

$$\cos(2\gamma) = (n-1)/(f_+ + f_- - 1) , \quad (III.5.3)$$

donde $n = \langle \hat{N} \rangle / 2\Omega = 2(q_0 + 1)$. Por lo tanto, reemplazando en (III.5.1), se obtiene

$$\begin{aligned}\langle \hat{H} \rangle &= 2\Omega \{ -\epsilon \cos(2\theta) - \frac{1}{2}g [q^2 - \frac{1}{4}(n-1)^2] + \frac{1}{2}g [\bar{r}^2 + n^2/4] / 2\Omega \} \\ &= 2\Omega \{ -\frac{1}{2}\epsilon (f_- - f_+) \cos(2\theta) - \frac{1}{8}g (n - f_+ - f_-) (2 - n - f_+ - f_-) \} ,\end{aligned}\quad (III.5.4)$$

donde en la última expresión hemos despreciado, de la manera usual, los términos de orden $1/2\Omega$, que representan la contribución de la interacción de apareamiento al potencial de Hartree-Fock (lo que equivale a una renormalización de las energías de p.i.). De

este modo, la energía media intensiva resulta independiente de Ω , cuando se escribe en términos de g (III.2.18).

Las ecuaciones autoconsistentes se obtienen al minimizar la energía libre

$$F = \langle \hat{H} \rangle - (2\Omega)T \sum_{\nu} [f_{\nu} \ln(f_{\nu}) + (1-f_{\nu}) \ln(1-f_{\nu})] , \quad (\text{III.5.5})$$

respecto de f_{ν} y θ (la conservación de $\langle \hat{N} \rangle$ ya ha sido incorporada en (III.5.3)). La minimización respecto de θ es inmediata y conduce a $\cos(2\theta) = 1$. La transformación general de Bogoliubov (III.3.3-4) se reduce pues a la de BCS, y la aproximación de c.i. a BCS térmico (BCST). Notemos que el ángulo ψ no aparece en la expresión de $\langle \hat{H} \rangle$, y puede ser arbitrario. Esta degeneración continua corresponde a la violación de la conservación del número de partículas hecha por la transformación (III.3.4).

Reemplazando la expresión (III.5.4) en (III.5.5) y derivando con respecto a f_{ν} , se obtiene

$$f_{\nu} = [1 + \exp(\varepsilon_{\nu}/T)]^{-1} , \quad (\text{III.5.6})$$

donde

$$\varepsilon_{\nu} = \frac{1}{2} (\nu\varepsilon + gq) . \quad (\text{III.5.7})$$

es la energía de c.i.. El gap Δ es dentro de este contexto

$$\Delta = \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle \hat{Q}_+ \rangle} = \frac{1}{2} g q \sin(2\gamma) = \frac{1}{4} g (1 - f_+ - f_-) \sin(2\gamma) . \quad (\text{III.5.8})$$

Las relaciones (III.5.6-7) conducen a la ecuación¹⁴

$$1 - 2q = \{1 + \exp[(\varepsilon + gq)/2T]\}^{-1} + \{1 + \exp[(-\varepsilon + gq)/2T]\}^{-1} , \quad (\text{III.5.9})$$

que constituye la ecuación del gap dentro de este contexto. Esta debe resolverse en el intervalo $|q_0| = \frac{1}{2} |n-1| \leq q \leq \frac{1}{2}$. Si $N = 2\Omega$ ($q_0 = 0$), el rango de variación de q es el máximo posible. De aquí en más, consideraremos este caso. (III.5.9) no depende de n , por lo que la solución de BCS resulta independiente del número de partículas para $q \geq (n-1)/2$.

Si $N = 2\Omega$, $\cos(2\gamma) = 0 \quad \forall T$, y el gap es directamente proporcional a q ,

$$\Delta = \frac{1}{2} gq = (1-f_+-f_-)\Delta_0, \quad (\text{III.5.10})$$

donde Δ_0 denota el gap a $T=0$.

En primer lugar, notemos que $q = 0$ constituye siempre una solución de la ecuación (III.5.9). Más aún, la restricción (III.5.2) queda automáticamente satisfecha si $f_+ + f_- = 1$, en cuyo caso la contribución de la fuerza de apareamiento se anula ($\Delta = 0$). Esta solución es la más baja a toda temperatura si

$$g < 4\epsilon \equiv g_c. \quad (\text{III.5.11})$$

Los números de ocupación son en este caso,

$$f_\nu = [1 + \exp(\frac{1}{2}\nu\epsilon/T)]^{-1}, \quad (\text{III.5.12})$$

o sea, la distribución usual de Fermi con el espectro del hamiltoniano no perturbado. Esta solución constituye desde el punto de vista de BCS una solución anormal, pues $f_\nu \rightarrow 1$ y no a 0 para $T \rightarrow 0$.

Para $g > 2\epsilon$, la ecuación (III.5.9) exhibe otras soluciones, las que deben ser comparadas con la solución anterior. Notemos que si $g < 2\epsilon$, la solución superconductora es altamente inestable a

$T=0$, pues en este caso f_- tiende a 1 cuando $q \rightarrow \frac{1}{2}$. En otras palabras, aparece como solución de las ecuaciones de BCST recién para $g > 2\epsilon$, y sólo para $g > 4\epsilon$ es esta solución la que provee la energía más baja a $T=0$.

Al aumentar la temperatura, q (y por lo tanto el gap) decrece, anulándose al llegar a una cierta temperatura crítica T_c . Para $T > T_c$, nuevamente permanece $q=0$ como la única solución de la ecuación del gap. Expandiendo (III.5.9) alrededor de $q=0$, se concluye que T_c satisface la ecuación¹⁴

$$(8T_c/g) \cosh^2(\epsilon/4T_c) = 1. \quad (\text{III.5.13})$$

La expresión (III.5.10) se reduce para $\epsilon=0$ al resultado para el modelo degenerado⁴. El presente modelo representa la generalización de aquél, permitiendo que exista una diferencia de energía ϵ entre los estados apareados.

No obstante, nuevos fenómenos pueden aparecer debido a que $\epsilon \neq 0$. Surgen dos situaciones diferentes, de acuerdo a si g es mayor o menor que $g'_c = 4.4668\epsilon$:

i) $g > g'_c$. Existen en este caso dos soluciones para T_c , correspondiendo la primera de ellas a la desaparición de un punto de ensilladura de la energía libre. Sólo la segunda posee significado físico. Esta corresponde a una transición de fase de segundo orden del sistema, con f_v continuo (pero derivada discontinua) en $T=T_c$.

ii) $4\epsilon < g < g'_c$. No existe en este caso solución real de la ecuación (III.5.9), lo que implica que el gap se anulará repentinamente a una temperatura determinada, que no satisface (III.5.13). Ocurre

en este punto una transición de fase no local de primer orden, y el sistema sufre un 'salto' hacia el estado no superconductor, con $\Delta = 0$. Esta transición refleja la transición de primer orden que ocurre a $T = 0$ en $g=4\epsilon$, en la cual el estado fundamental pasa de la fase normal a la fase superconductora. A temperatura finita, el orden de la transición se mantiene sólo para $g < g_c'$, 'suavizándose' para valores mayores.

En el caso i), puede mostrarse, prosiguiendo el desarrollo en serie de (III.5.10), que el gap tiende a 0 en forma proporcional a $(T_c - T)^{1/2}$, lo que implica una pendiente infinita en $T = T_c$.

En ambos casos i) y ii), para $T > T_c$ todas las funciones de estado se comportan como en el caso no perturbado, dejando de ser visible la interacción para $T > T_c$. Para $T \rightarrow \infty$, el sistema se acerca al estado de entropía máxima, con valores nulos de r y q .

El comportamiento anterior corresponde al tratamiento de BCS, es decir, al límite termodinámico. Si el número de partículas es finito, todas las discontinuidades se suavizan. A medida que N aumenta, los resultados exactos se aproximan monótonamente a los de BCS térmico. Las mayores diferencias ocurren en las regiones cercanas a la transición de fase.

Se muestra en la fig. 1 la evolución del gap en función de la temperatura, para distintos valores de g . La fig. 2 muestra el comportamiento del gap para distintos valores de N . Para N finito, se identifica al gap con $\frac{1}{2}g\langle Q \rangle / 2\Omega$, utilizando (III.5.10) y (III.4.1). El comportamiento de la energía media intensiva $E(T) = \langle \hat{H} / 2\Omega \rangle$ es mostrado en la fig. 3, para distintos valores de g , y del número de partículas $N=2\Omega$. Se ha utilizado la escalización $G = g / (2\Omega + 1)$, de modo de hacer coincidir la energía

para $T = 0$. Las figuras corroboran los comentarios anteriores.

Los resultados exactos para N finito han sido computados en el conjunto canónico completo de acuerdo a (III.2.2). Es notable el incremento del número total de estados accesibles (III.1.6) con N . Para $N = 10$ existen 185.756 estados, y para $N = 50$, 1.26×10^{30} .

Conviene remarcar que en el límite termodinámico, el estado del sistema se encuentra en este caso unívocamente determinado por q y r (o sea por f_+ , f_-), funciones de la temperatura. La evolución de sistema al aumentar T puede ser seguida pues en el plano " $q-r$ ", donde describe una trayectoria. La transición de fase ocurre cuando la trayectoria llega a la recta $q=0$.

Cabe destacar que el potencial químico es siempre nulo si $N = 2\Omega$. En efecto, la minimización del gran potencial $F - \mu \langle \hat{N} \rangle$ respecto de γ (véase (III.5.1-2)) da como resultado dos posibles soluciones: a) $\sin(2\gamma) = 0$ (fase normal) y b) $\cos(2\gamma) = -2\mu/(gq)$ (fase superconductora), de modo que

$$\langle \hat{N} \rangle = 2\Omega (f_+ + f_-), \quad \sin(2\gamma) = 0, \quad (\text{III.5.14a})$$

$$\langle \hat{N} \rangle = 2\Omega (4\mu/g + 1), \quad \cos(2\gamma) = -2\mu/(gq). \quad (\text{III.5.14b})$$

Por lo tanto, si $N = 2\Omega$, $\mu = 0$ tanto en la fase superconductora como en la normal.

Para $N \neq 2\Omega$, las soluciones difieren de las del caso anterior sólo cuando $q < |q_0|$. La transición a la fase 'normal' con $q = |q_0|$ tiene lugar a una temperatura menor (es decir, cuando q llega al valor $|q_0|$), y en esta fase, las energías de p.i. están dadas por $\epsilon_v = \frac{1}{2} \epsilon v - \mu$. Los números de ocupación difieren pues de (III.5.12), debiéndose despejar μ de (III.5.14a).

A $T = 0$, $f_{\nu} = \frac{1}{2}[n - \nu(1-|n-1|)]$ en la fase normal. Por lo tanto, la solución converge para $T \rightarrow 0$ a un estado de entropía no nula si $N \neq 2\Omega$ (exceptuando los casos triviales $N = 0$ y 4Ω) y $g < g_c = 4\epsilon/(1+2|q_0|)$, lo que refleja la degeneración del estado fundamental en la fase normal si $N \neq 2\Omega$. Si $g > g_c$, el estado base es superconductor a $T = 0$ (y no degenerado). El presente valor de g_c es equivalente a (III.1.16) en el límite termodinámico.

III.6 APAREAMIENTO MAS FUERZA MONOPOLAR

Estudiaremos en esta sección el hamiltoniano completo. Existen ahora tres elementos que compiten entre sí: interacción de apareamiento, interacción monopolar, y temperatura. El valor medio de \hat{H} es

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle = & 2\Omega \{ \epsilon \langle \hat{j}_z \rangle - \frac{1}{2} v (\langle \hat{j}_+ \rangle^2 + \langle \hat{j}_- \rangle^2) - \frac{1}{2} g [\langle \hat{q}_+ \rangle \langle \hat{q}_- \rangle + \\ & + (\frac{1}{4} \langle \hat{n} \rangle^2 - \langle \hat{j}_z \rangle^2 - \langle \hat{j}_+ \rangle \langle \hat{j}_- \rangle) / (2\Omega)] \} \end{aligned} \quad (III.6.1a)$$

$$\begin{aligned} = & 2\Omega \{ -\epsilon r \cos(2\theta) - v r^2 \sin^2(2\theta) - \frac{1}{2} g [q^2 - \frac{1}{4} (n-1)^2] \} , \\ & (III.6.1b) \end{aligned}$$

donde en (III.6.1b) se han despreciado los términos de orden $1/\Omega$, y se ha tenido en cuenta la conservación del número de partículas (III.5.2).

Las ecuaciones de HFBT se obtienen al minimizar la energía libre (III.5.5) (utilizando la expresión (III.6.1b)) respecto de θ , ϕ , y f_v . El ángulo θ juega en este caso un rol preponderante. El ángulo ϕ se ajusta de modo que $v \cos(2\phi) < 0$, por lo que el valor mínimo es independiente del signo de v . En lo sucesivo supondremos $v > 0$. La minimización respecto de θ implica por su parte,

$$\cos(2\theta) = 1 , \quad r < r_0 = \epsilon/2v , \quad (III.6.2a)$$

$$\cos(2\theta) = \epsilon/(2vr) , \quad r > r_0 . \quad (III.6.2b)$$

La solución (III.6.2a) corresponde a la fase normal, y (III.6.2.b) a la fase deformada, la cual es posible sólo en el caso $v > \epsilon$,

pues $r \leq \frac{1}{2}$. Esta fase es degenerada, pues el signo de θ (y por ende el de $\langle \hat{j}_\nu \rangle$) queda indeterminado, lo cual refleja la violación de la paridad $\exp(i\pi \hat{J}_z)$ (que conmuta en este caso con \hat{H}) por parte de la transformación (III.3.3). Reemplazando (III.6.2) en (III.6.1) se obtiene la energía media como función de r y q únicamente:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \hat{H} \rangle}{2\Omega} &= -\epsilon r - \frac{1}{2} g [q^2 - \frac{1}{4}(n-1)^2] , \quad r < r_c \\ &= -(\nu r^2 + \epsilon^2/4\nu) - \frac{1}{2} g [q^2 - \frac{1}{4}(n-1)^2] , \quad r > r_c . \end{aligned} \quad (\text{III.6.3})$$

Igualando a 0 las derivadas respecto de f_ν , se obtiene

$$f_\nu = [1 + \exp(\epsilon_\nu/T)]^{-1} , \quad (\text{III.6.4})$$

con

$$\begin{aligned} \epsilon_\nu &= \frac{1}{2} \nu \epsilon + \frac{1}{2} g q , \quad r < r_c , \\ &= \nu r + \frac{1}{2} g q , \quad r > r_c , \end{aligned} \quad (\text{III.6.5})$$

lo que implica el sistema de ecuaciones

$$1 - 2q = \sum_\nu [1 + \exp(\epsilon_\nu/T)]^{-1} , \quad (\text{III.6.6a})$$

$$2r = \sum_\nu \nu [1 + \exp(\epsilon_\nu/T)]^{-1} , \quad (\text{III.6.6b})$$

que constituyen las ecuaciones de HFBT para el presente caso. Supondremos $N = 2\Omega$. Para $r < r_c$, el sistema se reduce a la ecuación (III.6.6a) para q , siendo r determinado directamente por (III.6.6b). Por el contrario, si $q = 0$, la ecuación (III.6.6a) se satisface automáticamente, quedando para resolver sólo la ecuación (III.6.6b).

i) Interacción puramente monopolar:

Consideremos primero el caso en que $q=0$. HFBT se reduce entonces a la aproximación de HFT al modelo original de Lipkin. La ec. (III.6.6a) se resuelve trivialmente, dando como resultado $q=0$ (gap nulo). Para $r < r_c$, la ec. (III.6.6b) se resuelve también trivialmente, obteniéndose

$$r = \frac{1}{2} \operatorname{tgh}(\varepsilon/4T), \quad r < r_c, \quad (\text{III.6.7})$$

que equivale a (III.5.12). La expresión (III.6.7) conduce inmediatamente a la temperatura crítica (para $r=r_c$)

$$T_c = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{\ln\{(v+\varepsilon)/(v-\varepsilon)\}}, \quad (\text{III.6.8})$$

o sea,

$$v = \varepsilon / \operatorname{tgh}(\varepsilon/4T_c), \quad (\text{III.6.9})$$

de modo que para $T > T_c$, $r < r_c$, y la influencia de la interacción monopolar desaparece. A $T=0$, el sistema prefiere el estado con el mayor valor posible de r , es decir, $r = \frac{1}{2}$, y por lo tanto se encuentra en el estado normal si $r_c > \frac{1}{2}$, o sea,

$$v < v_c = \varepsilon, \quad (\text{III.6.10})$$

Si $v > v_c$, entonces $r_c < \frac{1}{2}$, y el sistema prefiere el estado 'deformado'. La transición de fase al aumentar v es de 2° orden.

La temperatura disminuye el efecto de la interacción, por lo que si $v < v_c$, el sistema seguirá en el estado normal para todo T . Por el contrario, si $v > v_c$, el sistema sufre una transición de 2° orden en $T = T_c$, a partir del cual el sistema vuelve al estado normal. La transición a temperatura finita es en este caso del mismo orden que la que ocurre a $T = 0$.

En la fig. 7 (véase sección III.8) se muestra la evolución de la energía media, de acuerdo a los resultados de HFT ($N \rightarrow \infty$) y exactos para $N = 10$ y 50 . Nuevamente, los valores para N finito se aproximan a los de HFT a medida que N aumenta. La trayectoria en el plano q, r se encuentra sobre el eje r y la transición ocurre cuando r cruza el valor crítico r_c . Notemos que $\langle \hat{j}_z \rangle$ es constante en la fase deformada, en virtud de (III.6.2b).

ii) Competencia entre ambas interacciones:

Volviendo al hamiltoniano completo, se deben resolver las ecuaciones (III.6.6) simultáneamente. El principal resultado que se obtiene es que si $q \neq 0$, entonces $r < r_c$ ($\alpha \neq 0$), y, recíprocamente, si $r > r_c$, entonces $q = 0$, de modo que el sistema no se encuentra nunca en una fase mixta deformada superconductora. Para T suficientemente alto, ambas interacciones son canceladas, volviendo el sistema al estado normal. La competencia entre ambas interacciones es mostrada en la fig. 4.

A $T=0$, el estado fundamental del sistema es superconductor para $v > v_c$ si

$$\begin{aligned} g > g_{c2} &= 2\{v(1-2|q_0|^2 + \epsilon^2/v)/\{1-4|q_0|^2\} \\ &= 2\{v + \epsilon^2/v\}, \quad \text{si } q_0 = 0, \quad (\text{III.6.11}) \end{aligned}$$

mientras que para $v < v_c$ rige obviamente la condición $g > g_c$. El valor de g_{c2} dado por (III.6.11) es mayor que el anterior, siendo necesaria una fuerza de apareamiento mayor si $v > v_c$ para que el sistema sea superconductor. Para $g < g_{c2}$, el sistema es deformado. Finalmente, si $v < v_c$ y $g < g_c$, el sistema puede ser descrito como normal. (III.6.11) coincide con el valor crítico exacto en el límite termodinámico.

Para $T \neq 0$, la situación permanece cualitativamente igual. Sin embargo, los valores críticos cambian al aumentar T , y además, $q < \frac{1}{2}$ en la región superconductora mientras que $\frac{1}{2} > r > r_c$ en la región deformada. La separatriz entre ambas regiones tiene un ligero desplazamiento hacia la fase deformada, a temperaturas finitas, indicando que en este modelo, la interacción monopolar es más afectada por la temperatura que la de apareamiento. Esto puede deducirse de las fórmulas para las temperaturas críticas. Los valores de v y g dados por (III.5.13) y (III.6.8) corresponden a las líneas punteadas que delimitan la zona normal, determinando el punto inicial de la separatriz a la temperatura dada. No obstante, el punto así determinado yace por debajo del correspondiente a $T=0$, dado por (III.6.11), dando así origen al corrimiento mencionado. Sin embargo, este efecto no se agrava a temperaturas altas, dado que el comportamiento asintótico de (III.5.13) y (III.6.8) es

$$g \simeq 8T[1 + (\epsilon/4T)^2], \quad (\text{III.6.12})$$

$$v \simeq 4T, \quad (\text{III.6.13})$$

de modo que la relación (III.6.11) se vuelve a cumplir. Esto implica que a muy altas temperaturas, ambas interacciones son afectadas por igual, y la separatriz vuelve a acercarse a la de $T=0$.

Si los parámetros g y v son tales que yacen en la pequeña región entre las separatrices, el sistema comienza a $T=0$ en la fase deformada, pero antes de pasar al estado normal, el sistema pasa al estado superconductor, teniendo lugar una transición de

fase de primer orden. A temperaturas superiores, el sistema sufre una segunda transición, pasando al estado normal. Con excepción de estos casos, la evolución del sistema al aumentar la temperatura es similar a los casos anteriores.

Para las energías de c.i., se obtiene en el caso general,

$$\varepsilon_\nu = \nu \varepsilon_r + \mu, \quad \text{sen}(2\gamma) = 0, \quad (\text{III.6.14})$$

$$\varepsilon_\nu = \nu \varepsilon_r + gq/2, \quad \text{cos}(2\gamma) = -2\mu/(gq),$$

$$\varepsilon_r = \varepsilon/2, \quad \text{sen}(2\theta) = 0, \quad (\text{III.6.15})$$

$$\varepsilon_r = \nu r, \quad \text{cos}(2\theta) = \varepsilon/(2\nu r),$$

las que deben reemplazarse en (III.6.4). Nuevamente, si $N = 2Q$, $\mu = 0$ en cualquier fase.

La fig. 5 muestra el comportamiento de las energías de c.i. para diferentes situaciones, en el caso $N = 2Q$. A $T = 0$ son iguales a $\pm \frac{1}{2} \nu$ en la fase deformada y a $\pm \varepsilon + \frac{1}{4}g$ en la fase superconductora.

Desde el punto de vista estadístico generalizado del Cap. I, es posible obtener aproximaciones de campo medio basadas en un conjunto reducido de observables. Si restringimos los observables relevantes a los operadores \hat{J}_z y \hat{Q}_z , sólo es visualizada la fase normal. Es necesario romper simetrías presentes en el hamiltoniano, e incluir los 'observables' \hat{J}_ν y \hat{Q}_ν en el exponente de $\hat{\rho}$, con el objeto de obtener una descripción correcta del sistema.

III.7 ESTADISTICAS RESTRINGIDAS PARA HAMILTONIANOS MONOPOLARES

Consideraremos en esta sección ciertos aspectos específicos concernientes a tratamientos estadísticos para hamiltonianos puramente monopoles (es decir aquellos que sean función únicamente de los operadores \hat{J}). Nos restringiremos al caso $N = 2\Omega$. La energía libre exacta de estos sistemas puede calcularse directamente en la forma¹⁹

$$F = -T \ln \left\{ \sum_{J=0}^{\Omega} Y_m(J) \text{Tr}'[\exp(-\beta \hat{H})] \right\}, \quad (\text{III.7.1})$$

donde

$$\begin{aligned} Y_m(J) &= \sum_{Q=0}^{\Omega-J} Y(J, Q) = \left[\frac{2\Omega}{\Omega-J} \right]^2 - \left[\frac{2\Omega}{\Omega-J-1} \right]^2, \quad J = 0, \dots, \Omega-1, \\ &= 1, \quad J = \Omega, \end{aligned} \quad (\text{III.7.2})$$

es el número total de estados con un valor dado de J y M (véase Ap. A). El valor (III.7.2) de $Y_m(J)$ puede hallarse también en forma directa. El número total de estados caracterizados por $M = K - \frac{1}{2}N$ ($0 \leq K \leq \frac{1}{2}N$) es $\left[\frac{N}{K} \right]^2$, de los cuales $\left[\frac{N}{K-1} \right]^2$ provienen de multipletes con $J > |M|$.

En el límite termodinámico, la minimización respecto de q en hamiltonianos monopoles implica $q = 0$. Por lo tanto, la expresión (III.2.14) se reemplaza dentro de este contexto por

$$f = \min_{r, \Omega'} \{h(r, \Omega') - Ts(r)\}, \quad (\text{III.7.3})$$

$$s(r) = -2 \left\{ \left(\frac{1}{2} + r \right) \ln \left(\frac{1}{2} + r \right) + \left(\frac{1}{2} - r \right) \ln \left(\frac{1}{2} - r \right) \right\}. \quad (\text{III.7.4})$$

Notemos que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{\ln(Y_m(N, J))}{N} \right] = s(r) , \quad (\text{III.7.5})$$

por lo que (III.7.3) puede derivarse directamente, prescindiendo de la integral sobre q en (III.2.10). La aproximación de HFBT se reduce en este caso a HFT, y los números medios de ocupación satisfacen la condición $f_+ + f_- = 1$, de modo que

$$\begin{aligned} S/2\Omega &= -2 \sum_{\nu} f_{\nu} \ln(f_{\nu}) \\ &= s(r) . \end{aligned} \quad (\text{III.7.6})$$

Se corrobora obviamente la equivalencia entre HFT y el límite termodinámico.

Las fórmulas anteriores han sido calculadas teniendo en cuenta el espacio completo de $SU(2) \times SU(2)$, donde el número total de estados accesibles está dado por (III.1.6). No obstante, existe la posibilidad de considerar accesibles sólo aquellos estados sin partículas apareadas, o sea, que sean autoestados de $\hat{n}_p = \sum_{\nu} c_{p\nu}^+ c_{p\nu}$ con autovalor 1. El álgebra correspondiente se reduce a $SU(2)$, y el valor de Q es siempre nulo. El número total de estados accesibles es menor que (III.1.6),

$$D' = 2^N , \quad (\text{III.7.7})$$

que corresponde al subespacio sin partículas apareadas (espacio restringido). El número total de estados con un valor dado de J (denotado por $Y'_m(J)$) es ahora menor que (III.7.2),

$$\begin{aligned} Y'_m(J) &= \begin{bmatrix} 2\Omega \\ \Omega-J \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2\Omega \\ \Omega-J-1 \end{bmatrix} , \\ &= N! (2J+1) / [(\frac{1}{2}N-J)! (\frac{N}{2}+J+1)!] , \end{aligned} \quad (\text{III.7.8})$$

dado que en el espacio restringido existen sólo $\left[\frac{N}{K} \right]$ estados con $M = K - \frac{1}{2}N$. La relación entre ambas multiplicidades está dada por

$$Y_m(J) = [Y'_m(J)]^2 (N+1) / (2J+1). \quad (\text{III.7.9})$$

La energía libre en el subespacio debe calcularse pues utilizando (III.7.8) en lugar de (III.7.2) en (III.7.1). En el límite termodinámico, notemos que

$$s'(r) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{\ln(Y'_m(N, J))}{N} \right] = \frac{1}{2} s(r), \quad (\text{III.7.10})$$

y,

$$f' = \min_{r, \Omega'} \{h(r, \Omega') - Ts'(r)\}. \quad (\text{III.7.11})$$

De (III.7.10-11) se extrae la conclusión que para $N \rightarrow \infty$, la temperatura necesaria para alcanzar una cierta energía libre se duplica en el espacio restringido, es decir, $f(T) = f'(2T)$. En particular, se duplican las temperaturas críticas. Este hecho refleja la disminución del número de estados accesibles. Para sistemas finitos, la reducción del espacio produce efectos similares, aunque en lo que respecta a temperaturas el factor no es exactamente 2. La energía libre en el espacio restringido es entonces menor en valor absoluto que en el espacio completo a una temperatura dada.

Los valores de J para los cuales se obtiene la máxima multiplicidad son respectivamente,

$$\begin{aligned} J'_{\max} &= [(N+2)^{1/2}/2], \\ J_{\max} &= [(N+2)/(8N+12)^{1/2}], \end{aligned} \quad (\text{III.7.12})$$

donde el corchete denota la parte entera. Ambas cantidades se comportan como $\propto N^{1/2}$ para N suficientemente grande, por lo que los límites intensivos son nulos.

Para N finito, el comportamiento asintótico de la energía libre es

$$F' \simeq -T N \ln(2) , \quad (\text{III.7.13})$$

$$F \simeq -T \ln \left(\frac{2^N}{N} \right) , \quad (\text{III.7.14})$$

en los espacios restringido y completo respectivamente. Para $N \rightarrow \infty$, se verifica $F = 2F'$.

III.8 LA APROXIMACION DE HARTREE FOCK TERMICO EN UN CONJUNTO

CANONICO

La aproximación usual de campo medio esta basada en el conjunto gran canónico, es decir, en la utilización de la distribución de Fermi Dirac. En el modelo del presente capítulo, la aproximación coincide en el límite termodinámico con el tratamiento exacto (canónico) en el espacio completo de $SU(2) \times SU(2)$ (para magnitudes intensivas). No obstante, en el caso de tratamientos estadísticos en el espacio restringido de $SU(2)$, es posible utilizar la aproximación de HFT directamente en el conjunto canónico exacto.

Para ello consideraremos como estados accesibles únicamente los 2^N estados sin partículas apareadas, con N fijo. Trabajaremos por consiguiente en un conjunto canónico restringido, y las fórmulas (III.3.9) y (III.3.14) para los números de ocupación y la entropía no serán ya válidos. El operador densidad de p.i. es en el presente contexto una función de los operadores \hat{J} solamente, y en la base diagonal puede escribirse en la forma

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \exp\{\lambda_0 + \sum_{p,\nu} \frac{1}{2}\nu\lambda c_{p\nu}^+ c_{p\nu}\} \\ &= \exp\{\lambda_0 + \lambda \hat{J}_z\} .\end{aligned}\tag{III.8.1}$$

Al calcular la traza en el espacio restringido se obtiene,

$$\lambda_0 = -N \ln[\exp(\lambda/2) + \exp(-\lambda/2)] ,\tag{III.8.2}$$

$$\langle c_{p\nu}^+ c_{p\nu} \rangle = \delta_{pp'} \delta_{\nu\nu'} f_{\nu} ,\tag{III.8.3}$$

con

$$\begin{aligned} f_{\nu}' &= \exp(\nu\lambda/2) / [\exp(\lambda/2) + \exp(-\lambda/2)] \\ &= [1 - \exp(-\lambda\nu)]^{-1} . \end{aligned} \quad (\text{III.8.4})$$

La expresión (III.8.4) difiere de la distribución de Fermi original (III.3.9) por un factor 2 en el exponente. La entropía de p.i. es ahora

$$\begin{aligned} S &= -\text{Tr}[\hat{\rho} \ln(\hat{\rho})] = -\sum_{\nu} f_{\nu}' \ln(f_{\nu}') \\ &= s'(r) , \end{aligned} \quad (\text{III.8.5})$$

por lo que se recupera el resultado (III.7.6), con la misma sustitución (III.4.1).

El operador estadístico (III.8.1) puede escribirse en este espacio como el producto de $N = 2\Omega$ factores independientes,

$$\hat{\rho} = \prod_p \exp\left\{ \sum_{\nu} \frac{1}{2} \nu \lambda c_{p\nu}'^+ c_{p\nu}' \right\} , \quad (\text{III.8.6})$$

en lugar de la forma usual (II.1.15). La validez del teorema de Wick para el cálculo de valores medios en el espacio restringido sufre entonces ciertas restricciones. Este sigue siendo válido sólo con respecto al producto de operadores elementales con distinto p . Para operadores de dos cuerpos se obtiene por ej.,

$$\langle c_{p\nu}'^+ c_{q\sigma}'^+ c_{q\sigma}' c_{p\nu}' \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\nu\nu'} f_{\nu}' f_{\sigma}' - \delta_{pq} \delta_{\nu\sigma'} \delta_{\sigma\nu'} f_{\nu}' f_{\sigma}' , \quad (\text{III.8.7a})$$

$$\langle c_{p\nu}'^+ c_{q\sigma}'^+ c_{q\sigma}' c_{p\nu}' \rangle' = (1 - \delta_{pq}) \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\nu\nu'} f_{\nu}' f_{\sigma}' \quad (\text{III.8.7b})$$

en los espacios completo y restringido respectivamente. Por consiguiente, las expresiones para valores medios de operadores

tales como \hat{N}^2 y \hat{J}_z^2 sufren modificaciones, aunque en particular, $\langle \hat{J}_y^2 \rangle$ (y por lo tanto el valor medio del hamiltoniano puramente monopolar) permanece igual en términos de los respectivos números de ocupación. No obstante, dado que las correcciones a los valores medios de productos de operadores colectivos son al menos de un orden menor que el término directo, en el límite termodinámico la coincidencia con los valores medios exactos sigue siendo válida. La aproximación de HFT en el espacio restringido (HFTR) sigue pues siendo exacta en el límite termodinámico, con resultados a una cierta temperatura T idénticos a los del espacio completo para $T/2$.

Finalmente, notemos que utilizando (III.8.4), $f_+ + f_- = 1$, de modo que las condiciones $\langle \hat{n}_p \rangle = 1$, $\langle \hat{N} \rangle = 2\Omega$ quedan satisfechas automáticamente. Se puede verificar utilizando la corrección al teorema de Wick (III.8.5b) que el número de partículas no fluctúa,

$$\begin{aligned} \langle \hat{N}^2 \rangle &= N(N-1)(f_+ + f_-)^2 + N(f_+ + f_-) \\ &= N^2. \end{aligned} \quad (\text{III.8.8})$$

La aproximación de HFTR representa pues una cota superior a la energía libre exacta en el espacio restringido (y no al gran potencial), como se muestra en la fig. 6. En el espacio completo, existe en cambio un punto de cruce en la región cercana a la temperatura crítica. Se observa que a pesar de la fluctuación no nula del número de partículas, los resultados en el espacio completo son comparables al tratamiento restringido. No obstante, HFTR proporciona la expresión asintótica exacta (III.7.13) para $T \rightarrow \infty$, lo que no sucede en el espacio completo.

La energía media intensiva es mostrada en la fig. 7, y comparada con los resultados exactos en ambos conjuntos. HFT proporciona mejores resultados en el espacio completo que en el restringido. Lo mismo sucede en general con otras magnitudes termodinámicas. La razón es que la distribución exacta se encuentra más concentrada en un dado multiplete J en el espacio completo que en el restringido, lo que compensa la fluctuación no nula del número de partículas.

III.9 LA APROXIMACION DE ESTADOS COHERENTES

Con el objeto de poseer otra aproximación que sirva de referencia a HFT, introduciremos la aproximación de estados coherentes, ampliada al espacio extendido de $SU(2) \times SU(2)$. Todo operador función de los operadores \hat{J} puede escribirse en forma diagonal utilizando la representación P (ver ap. B). Aplicando esta propiedad al operador estadístico exacto, se obtiene

$$\hat{\rho} = \sum_{J,Q,\alpha} \int P^{J,Q}(\Omega') |JQ\alpha\Omega'\rangle \langle JQ\alpha\Omega'| d\Omega', \quad (III.9.1)$$

El cálculo exacto de $P^{J,Q}(\Omega')$ (que no depende de α) puede realizarse utilizando las fórmulas (III.B.10) del ap. B. No obstante, la forma (III.9.1) del operador estadístico sugiere la siguiente aproximación: seleccionar un sólo término (J,Q,Ω') en (III.9.1), construyendo así un operador aproximado de la forma

$$\hat{\rho}_{ap}(J,q,\Omega') = d \sum_{\alpha} |JQ\alpha\Omega'\rangle \langle JQ\alpha\Omega'|, \quad (III.9.2)$$

con d una constante de normalización,

$$d = 1/Y(J,Q). \quad (III.9.3)$$

Los valores óptimos de J,Q,Ω' son aquellos que minimizan la energía libre,

$$\begin{aligned} F &\leq \text{Tr}[\hat{\rho}_{ap}(\hat{H} + T \ln(\hat{\rho}_{ap}))] \\ &= \text{Min}_{J,Q,\Omega'} \{ \langle JQ\Omega' | \hat{H} | JQ\Omega' \rangle - T \ln(Y(J,Q)) \}. \end{aligned} \quad (III.9.4)$$

Esta aproximación constituye siempre una cota superior a F.

Al derivar (III.9.4), hemos utilizado el resultado trivial $\ln(\hat{\rho}_{ap}) = \sum_{\alpha} [\ln(d) |JQ\alpha\Omega\rangle \langle JQ\alpha\Omega|]$, válido en virtud de la ortonormalidad $\langle JQ\Omega'\alpha | JQ\Omega'\alpha' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'}$.

Para hamiltonianos estrictamente monopolares, $Q=0$, pero la aproximación puede mejorarse incluyendo a Q directamente en la suma (III.9.2). De este modo, las fórmulas (III.9.1-4) se reemplazan por

$$\hat{\rho} = \sum_{J,Q,\alpha} \int P^J(\Omega) |JQ\alpha\Omega\rangle \langle JQ\alpha\Omega| d\Omega, \quad (III.9.5)$$

$$\hat{\rho}_{ap}(J, \Omega') = d \sum_{\alpha, Q} |JQ\alpha\Omega'\rangle \langle JQ\alpha\Omega'|, \quad (III.9.6)$$

$$d = 1/Y_m(J), \quad (III.9.7)$$

$$F \leq \min_{J, \Omega'} \{ \langle J\Omega' | \hat{H} | J\Omega' \rangle - T \ln[Y_m(J)] \}. \quad (III.9.8)$$

Finalmente, en el espacio restringido de $SU(2)$, Q es siempre nulo, por lo que la suma sobre Q en (III.9.5-7) queda suprimida. En lugar de (III.9.8) se obtiene

$$F \leq \min_{J, \Omega} \{ \langle J\Omega | \hat{H} | J\Omega \rangle - T \ln[Y'_m(J)] \}. \quad (III.9.9)$$

La aproximación posee la ventaja de proveer una cota superior a la energía libre exacta en el caso de tratamientos en el espacio completo. Además, permite definir el concepto de transición de fase para un número finito de partículas, al escoger una única componente " J, Ω' ", la cual puede sufrir cambios abruptos. No obstante, la energía libre provista por la aproximación es una sucesión de segmentos, y los resultados son en general comparables o inferiores a los de de HFT (véase fig. 8), que constituye el límite termodinámico de la aproximación de estados coherentes.

III.10 FLUCTUACIONES

La aproximación de campo medio, si bien está bien adaptada para proporcionar valores medios precisos de operadores de un cuerpo, no predice adecuadamente el valor de las correspondientes fluctuaciones¹⁵. Con respecto al número de partículas, cabe destacar que las fluctuaciones poseen un origen térmico (si se trabaja en el conjunto gran canónico) y además un origen cuántico en la fase superconductora (matriz $V \neq 0$ en (II.2.9)).

En un tratamiento exacto en el conjunto gran canónico,

$$\langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2 \equiv \sigma_N^2, \quad (\text{III.10.1})$$

puede ser identificado con la magnitud (véase (I.3.11))

$$\sigma_N^2 = T \frac{\partial \langle \hat{N} \rangle}{\partial \mu}. \quad (\text{III.10.2})$$

No obstante, en la aproximación de campo medio, σ_N^2 y $\sigma_{O_i}^2$ no coinciden necesariamente, aún en el límite termodinámico. En general, en un tratamiento exacto,

$$\sigma_{O_i}^2 = \langle \hat{O}_i^2 \rangle - \langle \hat{O}_i \rangle^2, \quad (\text{III.10.3})$$

coincide con

$$\sigma_{O_i}^2 = T \frac{\partial \langle \hat{O}_i \rangle}{\partial \mu_i}, \quad (\text{III.10.4})$$

donde μ_i es el potencial químico asociado a \hat{O}_i (véase (I.2.11)), y \hat{O}_i un operador que conmuta con $\hat{\rho}$. Esta identidad no es necesariamente válida en la aproximación de campo medio (ver

sección I.4). $\sigma_{o_i}^2$ es el valor de la fluctuación dado por el operador densidad aproximado, pero puede ocurrir que $\sigma_{o_i}^2$ esté más cerca del valor exacto.

Consideremos en primer lugar las fluctuaciones del número de partículas, las cuales son ilustradas en la fig. 9 como función de la temperatura y para fases diferentes. Utilizando el teorema de Wick se obtiene,

$$\sigma_N^2 = 2\Omega\{2n - n^2 - (f_+ + f_- - 2f_+f_-)\}, \quad (\text{III.10.5})$$

donde $n = \langle \hat{N} \rangle / 2\Omega$, expresión que se reduce a

$$\sigma_N^2 = 2\Omega \sum_{\nu} f_{\nu}(1-f_{\nu}), \quad (\text{III.10.6})$$

cuando $f_+ + f_- = N/2\Omega$ (fase normal o deformada). Los resultados muestran cambios significativos en la magnitud de σ_N^2 , dependiendo de la fase para una temperatura baja fija T , y también cambios considerables en σ_N^2 al aumentar T dentro de una misma fase, particularmente para T cercano a T_c .

La línea suave con $v = g = 0$ representa el caso no perturbado, el cual se comporta como un 'atractor' para las soluciones perturbadas para temperaturas suficientemente altas. La aproximación coincide en este caso con un tratamiento exacto en el conjunto gran canónico, teniendo las fluctuaciones un origen puramente térmico. En el caso de una interacción monopolar, las fluctuaciones disminuyen en la fase deformada ($T < T_c$), dado que la interacción favorece un mayor grado de orden a bajas temperaturas. En el caso $g=5$, $v=0$, las fluctuaciones del número de partículas

poseen un origen cuántico a $T=0$, y dado que la temperatura disminuye los efectos de la interacción, las fluctuaciones decrecen al aproximarse T a T_c .

σ_N^2 coincide con $\sigma_N'^2$ tanto en la fase normal como en la deformada (para $N = 2\Omega$), pero no en la superconductora, en la cual (véase (III.5.14b))

$$\sigma_N'^2 = T \frac{\partial \langle \hat{N} \rangle}{\partial \mu} = 2\Omega (4T/g) , \quad T < T_c . \quad (\text{III.10.7})$$

$\sigma_N'^2$ difiere apreciablemente de σ_N^2 , y posee el comportamiento opuesto, anulándose a $T = 0$. Para $T = T_c$, la expresión (III.10.7) coincide con (III.10.6), de modo que no existe discontinuidad en la transición de fase. En el límite termodinámico, (III.10.7) debe ser interpretado como la fluctuación exacta del número de partículas en el conjunto gran canónico, dando una mejor estimación que σ_N^2 para N finito.

La fig. 10 muestra el valor medio intensivo $\langle \hat{j}_z \rangle$ en función de T , para el hamiltoniano de apareamiento ($v=0$), con $g > g_c'$. Los valores exactos para N finito han sido computados en el conjunto canónico completo, y se encuentran muy próximos a los de BCST excepto en la región de transición.

La fig. 11 muestra la correspondiente fluctuación, que de acuerdo al teorema de Wick, puede ser expresada en BCST como

$$\sigma_z^2 / 2\Omega = \sum_{\nu} f_{\nu} (1-f_{\nu}) / 4 , \quad (\text{III.10.8})$$

es decir, proporcional a $\sigma_N'^2 / 2\Omega$ en la fase normal. Los valores

dados por BCST difieren de los exactos especialmente para N grande (por ej. N=50) en la región crítica, lo cual sugiere que las correcciones al teorema de Wick no pueden ser despreciadas aún cuando N crece, al calcular fluctuaciones. La magnitud

$$\sigma_z'^2/2\Omega = -T \frac{\partial \langle \hat{j}_z \rangle}{\partial \varepsilon} , \quad (\text{III.10.9})$$

coincide con la fluctuación en el tratamiento exacto, de acuerdo a (I.3.11), y debe coincidir con (III.10.8) en la fase normal. Utilizando (III.5.9) se obtiene

$$T \frac{\partial r}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{4} \sum_{\nu} \nu R_{\nu} (\nu + g \partial q / \partial \varepsilon) , \quad (\text{III.10.10})$$

$$T \frac{\partial q}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{4} \sum_{\nu} R_{\nu} (\nu + g \partial q / \partial \varepsilon) , \quad (\text{III.10.11})$$

donde

$$R_{\nu} = - \frac{\partial f_{\nu}}{\partial (\varepsilon_{\nu}/T)} = f_{\nu} (1 - f_{\nu}) . \quad (\text{III.10.12})$$

Por lo tanto,

$$\frac{\partial q}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{4} (\sum_{\nu} \nu R_{\nu} / T) [1 - (g/4T) \sum_{\nu} R_{\nu}]^{-1} , \quad (\text{III.10.13})$$

y

$$\begin{aligned} \sigma_z'^2/2\Omega &= T \frac{\partial r}{\partial \varepsilon} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\nu} R_{\nu} + (g/16T) (\sum_{\nu} \nu R_{\nu})^2 [1 - (g/4T) \sum_{\nu} R_{\nu}]^{-1} ; T < T_c \quad (\text{III.10.14a}) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{\nu} R_{\nu} ; T > T_c , \quad (\text{III.10.14b})$$

de modo que la diferencia $\sigma_z^2 - \sigma_z'^2$ no se anula para $T < T_c$. La corrección al teorema de Wick dado por el segundo término en el

miembro derecho de (III.10.14a), depende explícitamente de q , posee un fuerte máximo en $T = T_c$, y se origina en la dependencia de ϵ_ν con q . Las expresiones (III.10.14) proporcionan la fluctuación exacta en el límite termodinámico, y exhiben una discontinuidad en el punto crítico. Los resultados numéricos muestran que (III.10.14) refleja mejor el comportamiento exacto que (III.10.9) para valores no muy pequeños de N .

El calor específico $\partial \langle \hat{H} \rangle / \partial(T)$ también difiere de σ_H^2 / T^2 , para $T < T_c$. En la fase normal, la igualdad rige sólo cuando se desprecian términos que se anulan (en magnitudes intensivas) para $N \rightarrow \infty$ ($\sigma_H^2 / 2\Omega$ depende del número de partículas en la aproximación de campo medio si \hat{H} posee términos de dos o más cuerpos, y puede ser no nula aún a $T = 0$). Siguiendo el procedimiento anterior, se obtiene el resultado

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial T} &= T \frac{\partial S}{\partial T} \\ &= 2\Omega \{ -\epsilon \partial(r) / \partial(T) - gq \partial(q) / \partial(T) \}, \quad (\text{III.10.15}) \end{aligned}$$

con

$$\frac{\partial q}{\partial T} = \sum_{\nu} \left(-\frac{1}{2} R_{\nu} \epsilon_{\nu} / T^2 \right) [1 - (g/4T) \sum_{\nu} R_{\nu}]^{-1}, \quad (\text{III.10.16})$$

$$\frac{\partial r}{\partial T} = \sum_{\nu} \left(-\frac{1}{2} \nu R_{\nu} \epsilon_{\nu} / T^2 \right) - (g/4T) \left(\sum_{\nu} \nu R_{\nu} \right) \partial q / \partial T, \quad (\text{III.10.17})$$

Tanto (III.10.16) como (III.10.17) divergen para $T \rightarrow T_c$. Sin embargo el calor específico (III.10.15) permanece finito si $g > g_c$. Divergencias en el calor específico y otros tipos de fluctuaciones ocurren en el intervalo $4\epsilon < g < g'_c$ en BCST, donde la transición de fase es no local, divergiendo las derivadas

(III.10.9) y (III.10.15).

En el caso de una interacción puramente monopolar, ($q=0$), el calor específico puede ser evaluado con ayuda de las ecuaciones (III.6.3) (en lo sucesivo supondremos $v>0$),

$$\frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial T} = -2\Omega(2vr \partial(r)/\partial(T)) , \quad T < T_c \quad (\text{III.10.18})$$

$$= 2\Omega\left(\frac{1}{4}\sum_{\nu} R_{\nu}\right)\epsilon/T^2 , \quad T > T_c \quad (\text{III.10.19})$$

con

$$\frac{\partial r}{\partial T} = -\frac{1}{2} \left(\sum_{\nu} R_{\nu} vr/T^2 \right) \left[1 - \left(\frac{1}{2}v/T \right) \sum_{\nu} R_{\nu} \right]^{-1} . \quad (\text{III.10.20})$$

La dependencia de ϵ_{ν} con la temperatura origina el denominador de (III.10.20). Del mismo modo que en la situación anterior, $\sigma_H^2 \neq \sigma_H'^2 = T^2 \partial \langle \hat{H} \rangle / \partial(T)$ en la fase deformada. La fig. 12 ilustra resultados para σ_H^2 (calculados en el límite termodinámico) y $\sigma_H'^2$. También es mostrada la fluctuación exacta de la energía (calculada en el conjunto canónico completo) para diferentes valores de N.

APENDICE A

EL FACTOR DE MULTIPLICIDAD

Con el objeto de derivar la igualdad (III.1.9)¹⁴, introducimos los operadores

$$\hat{n}_p = \sum_{\mu} c_{p\mu}^+ c_{p\mu}, \quad (\text{III.A.1})$$

que cuentan el número de partículas con un valor dado de p . Si P denota el número de pares de partícula (o sea, con autovalor $n_p=2$) y R el número de pares de agujero ($n_p=0$), el valor de Q y Q_0 quedará determinado por la configuración de los $P+R$ estados 'apareados', mientras que el valor de J y M por los restantes $2\Omega-P-R$ estados con $n_p=1$.

El máximo valor posible de J será $J_{\max} = (2\Omega-P-R)/2$. Para P y R fijos, existen $\begin{bmatrix} 2J_{\max} \\ K \end{bmatrix}$ estados con $|M| = J_{\max} - K$, de los cuales $\begin{bmatrix} 2J_{\max} \\ K-1 \end{bmatrix}$ provienen de multipletes con $J > |M|$, perteneciendo los restantes al multiplete $J = J_{\max} - K$. Del mismo modo, el máximo valor posible de Q será $Q_{\max} = (P+R)/2$, y existen $\begin{bmatrix} 2Q_{\max} \\ L \end{bmatrix}$ estados con $|Q_0| = Q_{\max} - L$, de los cuales $\begin{bmatrix} 2J_{\max} \\ L-1 \end{bmatrix}$ provienen de multipletes con $Q > |Q_0|$. Así, escribiendo a J y Q de la forma (K y $L \in \mathbb{N}$)

$$J = (2\Omega-P-R)/2 - K, \quad \delta \leq J \leq (2\Omega-P-R)/2, \quad (\text{III.A.2})$$

$$Q = (P+R)/2 - L, \quad |Q_0| \leq Q \leq (P+R)/2,$$

donde δ es la parte fraccionaria de $N/2$, el número total de estados con un valor dado de J , Q y $P+R$ es

$$\begin{aligned}
W(J, Q, P+R) &= \begin{pmatrix} 2\Omega \\ P+R \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 2\Omega-P-R \\ K \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2\Omega-P-R \\ K-1 \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} P+R \\ L \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} P+R \\ L-1 \end{pmatrix} \right] \\
&= \frac{(2\Omega)! (2J+1) (2Q+1)}{[(2\Omega-P-R)/2-J]! [(2\Omega-P-R)/2+J+1]! [(P+R)/2-Q]! [(P+R)/2+Q+1]!} \\
&\quad (III.A.3)
\end{aligned}$$

Dado que $|N-2\Omega| \leq P+R \leq 2(\Omega-\delta)$, entonces

$$\begin{aligned}
|Q_0| &\leq Q \leq \Omega - \delta, \\
\delta &\leq J \leq \Omega - |Q_0|, \\
|Q_0| + \delta &\leq J + Q \leq \Omega,
\end{aligned} \quad (III.A.4)$$

donde $Q_0 = N/2 - \Omega$. Para valores fijos de J y Q , $P+R$ se encuentra en el intervalo

$$2Q \geq P + R \geq 2(\Omega - J). \quad (III.A.5)$$

Sumando entonces la expresión (III.A.3) respecto de $P+R$ sobre el intervalo (III.A.5), se obtiene el resultado final (III.1.9). Se verifican las igualdades

$$\sum_{Q=|Q_0|}^{\Omega-\delta} \sum_{J=\delta}^{\Omega-Q} (2J+1) Y(J, Q) = \begin{pmatrix} 4\Omega \\ 2(Q_0 + \Omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4\Omega \\ N \end{pmatrix}, \quad (III.A.6)$$

$$\sum_{Q=|Q_0|}^{\Omega-\delta} Y(J, Q) = \begin{pmatrix} 2\Omega \\ \Omega-J \end{pmatrix}^2 - \begin{pmatrix} 2\Omega \\ \Omega-J-1 \end{pmatrix}^2. \quad (III.A.7)$$

$$= Y_m(J). \quad (III.A.7)$$

La cantidad $Y_m(J)$ puede hallarse directamente¹⁹, y representa el número total de estados con un valor dado de J .

APENDICE B

ESTADOS ATOMICOS COHERENTES

El estado atómico coherente¹⁶ $|J, \Omega\rangle$ se obtiene al aplicar la rotación de $SU(2)$ de ángulo sólido Ω al estado $|J, -J\rangle$:

$$|J, \Omega\rangle = U(\Omega) |J, -J\rangle ,$$

$$\begin{aligned} U(\Omega) &= \exp\left\{ \frac{\vartheta}{2} (e^{-i\phi} \hat{J}_+ - e^{i\phi} \hat{J}_-) \right\} \\ &= \exp\{\tau \hat{J}_+\} \exp\{\ln(1+|\tau|^2) \hat{J}_z\} \exp\{-\tau^* \hat{J}_-\} , \quad (\text{III.B.1}) \end{aligned}$$

donde $\Omega = (\vartheta, \phi)$ y $\tau = e^{-i\phi} \operatorname{tg}(\vartheta/2)$. Los estados coherentes existen por lo tanto en correspondencia biunívoca con puntos en la esfera de Bloch. Utilizando la última expresión de (III.B.1) se obtiene la forma mas explícita

$$|J, \Omega\rangle = (1+|\tau|^2)^{-J} \exp\{\tau \hat{J}_+\} |J, -J\rangle \quad (\text{III.B.2a})$$

$$= \sum_{M=-J}^J \left[\begin{matrix} 2J \\ M+J \end{matrix} \right]^{1/2} \operatorname{sen}^{J+M}(\vartheta/2) \cos^{J-M}(\vartheta/2) e^{-i(J+M)\phi} |J, M\rangle, \quad (\text{III.B.2b})$$

Resumiremos a continuación las propiedades más relevantes de los estados $|J, \Omega\rangle$. Estos estados forman una base no ortogonal y sobrecompleta,

$$\langle J, \Omega | J, \Omega' \rangle = \left[\frac{(1+\tau^* \tau')^2}{(1+|\tau|^2)(1+|\tau'|^2)} \right]^J , \quad (\text{III.B.3})$$

$$|\langle J, \Omega | J, \Omega' \rangle|^2 = \cos^4(\vartheta/2) , \quad (\text{III.B.4})$$

$$\frac{2J+1}{4\pi} \int |J, \Omega\rangle \langle J, \Omega| d\Omega = I , \quad (\text{III.B.5})$$

donde θ es el ángulo entre las direcciones especificadas por Ω y Ω' ,

$$\cos(\theta) = \cos(\theta)\cos(\theta') + \sin(\theta)\sin(\theta')\cos(\phi - \phi'), \quad (\text{III.B.6})$$

y $d\Omega = \sin(\theta)d\theta d\phi$. La integral es sobre toda la esfera de Bloch. Las fórmulas (III.B.3-5) se derivan directamente a partir de la expresión (III.B.2).

Los estados $|J, \Omega\rangle$ son paquetes de mínima incerteza, satisfaciendo

$$\langle \hat{J}_x^2 - \langle \hat{J}_x \rangle^2 \rangle \langle \hat{J}_y^2 - \langle \hat{J}_y \rangle^2 \rangle = \langle \hat{J}_z \rangle^2 / 4, \quad (\text{III.B.7})$$

y demás permutaciones cíclicas, para valores medios tomados respecto de (III.B.1). Los operadores $(\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ pueden ser también operadores rotados $(\hat{J}'_x, \hat{J}'_y, \hat{J}'_z) = U(\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)U^\dagger$.

Conviene remarcar que si $|J, -J\rangle$ es un D.S., $|J, \Omega\rangle$ también lo es, pues la expresión (III.B.2a) coincide por la dada por el teorema de Thouless (ver apéndice II.A) para un D.S. cualquiera no ortogonal a $|J, -J\rangle$. De este modo, en el contexto del presente capítulo, $|J, \Omega\rangle$ será un D.S. sólo si $J = \Omega_c$ (degeneración de la capa).

Todo operador \hat{O} función de los operadores $\hat{J}_+, \hat{J}_-, \hat{J}_z$, puede ser expandido en forma 'diagonal' en los estados $|J, \Omega\rangle$:

$$\hat{O} = \frac{2J+1}{4\pi} \int |J, \Omega\rangle P_J(\hat{O}, \Omega) \langle J, \Omega| d\Omega. \quad (\text{III.B.8})$$

La función $P_J(\hat{O}, \Omega)$ determina a \hat{O} , y puede desarrollarse en armónicos esféricos

$$P_J(\hat{O}, \Omega) = \sum_{l,m} O_{lm} Y_{lm}(\Omega), \quad (\text{III.B.9})$$

donde sólo los primeros $(2J+1)^2$ términos contribuyen en (III.B.8), los que quedan determinados por los $2J+1$ elementos $\langle J, M | \hat{O} | J, M' \rangle$. Para hallar $P_j(\hat{O}, \Omega)$ es conveniente expandir \hat{O} en términos de los operadores tensoriales irreducibles $\hat{Y}_{LM}(\vec{J})$, para los cuales¹⁶

$$P_j(\hat{Y}_{LM}(\vec{J}), \Omega) = \frac{(2J+1+L)!}{(2J+1)! 2^L} Y_{lm}(\Omega) . \quad (\text{III.B.10})$$

$P_j(\hat{O}, \Omega)$ es denominada usualmente representación P del operador. Análogamente, se define una representación $Q_j(\hat{O}, \Omega)$ igual al valor medio,

$$Q_j(\hat{O}, \Omega) = \langle J, \Omega | \hat{O} | J, \Omega \rangle . \quad (\text{III.B.11})$$

$$Q_j(\hat{Y}_{LM}(\vec{J}), \Omega) = \frac{(2J)!}{(2J-L)! 2^L} Y_{lm}(\Omega) . \quad (\text{III.B.12})$$

La traza del operador \hat{O} en el espacio de dimensión $2J+1$ puede expresarse en términos de P o Q:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_j[\hat{O}] &= \frac{2J+1}{4\pi} \int Q_j(\hat{O}, \Omega) d\Omega \\ &= \frac{2J+1}{4\pi} \int P_j(\hat{O}, \Omega) d\Omega , \end{aligned} \quad (\text{III.B.13})$$

y la de un producto de operadores en la forma simétrica

$$\text{Tr}_j[\hat{O}\hat{O}'] = \frac{2J+1}{4\pi} \int P_j(\hat{O}, \Omega) Q_j(\hat{O}', \Omega) d\Omega . \quad (\text{III.B.14})$$

Las representaciones P y Q pueden utilizarse para obtener cotas¹⁰ a la traza de operadores hermíticos $\exp\{\hat{O}\}$ en el espacio de dimensión $2J+1$, por medio de las desigualdades

$$\frac{2J+1}{4\pi} \int \exp\{Q_j(\hat{O}, \Omega)\} d\Omega \leq \text{Tr}[\exp\{\hat{O}\}] \leq \frac{2J+1}{4\pi} \int \exp\{P_j(\hat{O}, \Omega)\} d\Omega \quad (\text{III.B.15})$$

La cota inferior es una generalización de la conocida desigualdad para valores medios de funciones cóncavas hacia arriba. La deducción de la cota superior es más compleja y se debe a Lieb¹⁸.

En el límite termodinámico, conviene trabajar con los operadores intensivos $\hat{Y}_{LM}(\vec{J}/N) = N^{-L} \hat{Y}_{LM}(\vec{J})$ para los cuales

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} Q_j(\hat{Y}_{LM}(\vec{J}/N), \Omega) &= r^L Y_{lm}(\Omega) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} P_j(\hat{Y}_{LM}(\vec{J}/N), \Omega), \end{aligned} \quad (\text{III.B.16})$$

donde $r = \lim_{N \rightarrow \infty} J/N$. Por consiguiente, para cualquier operador \hat{O} ,

el límite termodinámico de las representaciones P y Q existe si

$$\hat{O} = \sum_{L,M} A_{LM} N^{-L} \hat{Y}_{LM}(\vec{J}), \quad (\text{III.B.17})$$

con los coeficientes $A_{LM} = A_{L-M}^*$ independientes de N . De este modo se obtiene la expresión general

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} P_j(\hat{O}, \Omega) &= \lim_{N \rightarrow \infty} Q_j(\hat{O}, \Omega) \\ &= \sum_{l,m} A_{lm} r^L Y_{lm}(\Omega). \end{aligned} \quad (\text{III.B.18})$$

La igualdad (III.B.16) implica que ambas cotas en (III.B.15) convergen al mismo valor en el límite termodinámico, obteniéndose

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \{\text{Tr}_j[\exp(\hat{O})]/(2J+1)\} = \frac{1}{4\pi} \int \exp\{\lim_{N \rightarrow \infty} Q_j(\hat{O}, \Omega)\} d\Omega \quad (\text{III.B.19})$$

Referencias

1. A. L. Goodman, Nucl. Phys. A 352, 30 (1981).
2. M. Brack and P. Quentin, Nucl. Phys. A 361, 35 (1981).
3. A. L. Goodman, Nucl. Phys. A 406, 94 (1983); A 402, 189 (1983).
4. O. Civitarese, O. Broglia, R. Dasso, Ann. of Phys. (N.Y.) 156, 142 (1984).
O. Civitarese and A. De Paoli, Nucl. Phys. A 440, 480 (1985).
5. R. M. Lieder and H. Ryde, 'Advances in Nuclear Physics', ed. M. Baranger and E. Vogt (Plenum, N.Y., 1978), Vol. 10.
6. O. Civitarese, A. Plastino and A. Fässler, Z. Phys. 313, 197 (1983).
7. O. Civitarese, A. Plastino and A. Fässler, J. of Phys. G 9, 1063 (1983).
8. H.J. Lipkin, N. Meshkov and A. J. Glick, Nucl. Phys. 62, 188 (1965).
9. D. Agassi, H. J. Lipkin, and N. Meshkov, Nucl. Phys. 86, 321 (1966).
10. R. Gilmore and D. H. Feng, Nucl. Phys. A301, 189 (1978).
11. D. H. Feng, R. Gilmore, and L. M. Narducci, Phys. Rev. C 19, 1119 (1979).
12. R. Gilmore, 'Catastrophe Theory for Scientists and Engineers' (Wiley, N.Y., 1981).
13. R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. C30, 1360 (1984).
14. R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. C32, 1040 (1985).
15. R. Rossignoli, A. Plastino, and J. P. Vary, a publicarse.
16. F. T. Arecchi, E. Courtens, R. Gilmore and A. Thomas, Phys. Rev. A 6, 211 (1972).

17. M. Cambiaggio and A. Plastino, Z. Phys. A 288, 153 (1978).
18. H. Lieb, Comm. Math. Phys. 31, 340 (1973).

Figura 1. El Gap (III.5.10) como función de la temperatura, para distintos valores de g . En todas las figuras, las constantes de acoplamiento y la temperatura se expresan en unidades de ϵ , y el número de partículas es $N = 2\Omega$.

Figura 2. Gap en función de la temperatura, de acuerdo a resultados exactos (véase sección III.5), para distintos valores del número de partículas N , y de BCST, para el caso $g/\epsilon = 5.0$.

Figura 3. Energía media por partícula $E(T)$ como función de la temperatura para el hamiltoniano de apareamiento, para distintos valores de las constantes de acoplamiento. Las líneas de trazos corresponden a resultados exactos, y las líneas llenas a BCST.

Figura 4. Fases normal, superconductora y deformada, en el plano " g, v ", a $T=0$ y a temperatura finita.

Figura 5. Energías de c.i. (III.6.14-15) para diferentes valores de las constantes de acoplamiento (la constante no indicada es nula).

Figura 6. Energía libre intensiva como función de la temperatura relativa para el hamiltoniano monopolar, en el espacio restringido (a) y completo (b), de acuerdo a resultados de HFT, y resultados exactos para diferentes valores de N . La constante de acoplamiento es $v/\epsilon = 5$.

Figura 7. Energía media intensiva como función de la temperatura relativa para el caso de la fig. 6. Las líneas llenas corresponden a resultados exactos en el espacio completo, y las líneas punteadas al tratamiento restringido. HFT coincide en ambos conjuntos como función de T/T_c .

Figura 8. Energía libre intensiva de acuerdo a resultados exactos (líneas llenas), HFT (líneas punteadas) y aproximación de estados coherentes (líneas de trazos), en función de la temperatura absoluta. (a) corresponde al espacio restringido y (b) al espacio completo. El número de partículas es $N = 50$, y la constante de acoplamiento $v/\epsilon = 5$.

Figura 9. Fluctuación intensiva del número de partículas como función de la temperatura, en diferentes fases, para distintos valores de las constantes de acoplamiento. Se indican las temperaturas críticas. La línea de trazos representa la corrección (III.10.7) en la fase superconductora.

Figura 10. Valor medio de $\hat{j}_z = \hat{J}_z/N$ en función de la temperatura, para el hamiltoniano de apareamiento, con $g/\epsilon = 5$, de acuerdo a resultados exactos para $N = 10$ (a) y $N = 50$ (b) y BCST (c).

Figura 11. La fluctuación intensiva de \hat{j}_z en función de T , para los mismos parámetros de la fig. 10. Las líneas llenas corresponden a resultados exactos para $N = 10$ (a) y $N = 50$ (b), las de trazos a BCST. (c) indica la evaluación directa (III.10.8) y (d) la expresión corregida (III.10.14a), que muestra el comportamiento correcto para valores grandes de N . La línea punteada indica la discontinuidad en $T = T_c$.

Figura 12. Fluctuación intensiva de la energía para el hamiltoniano puramente monopolar, con $v/\epsilon = 5$. Los resultados exactos (líneas llenas) corresponden a $N = 10$ (a) y $N = 50$ (b). (c) indica la evaluación directa de HFT, (d) la corrección (III.10.20).

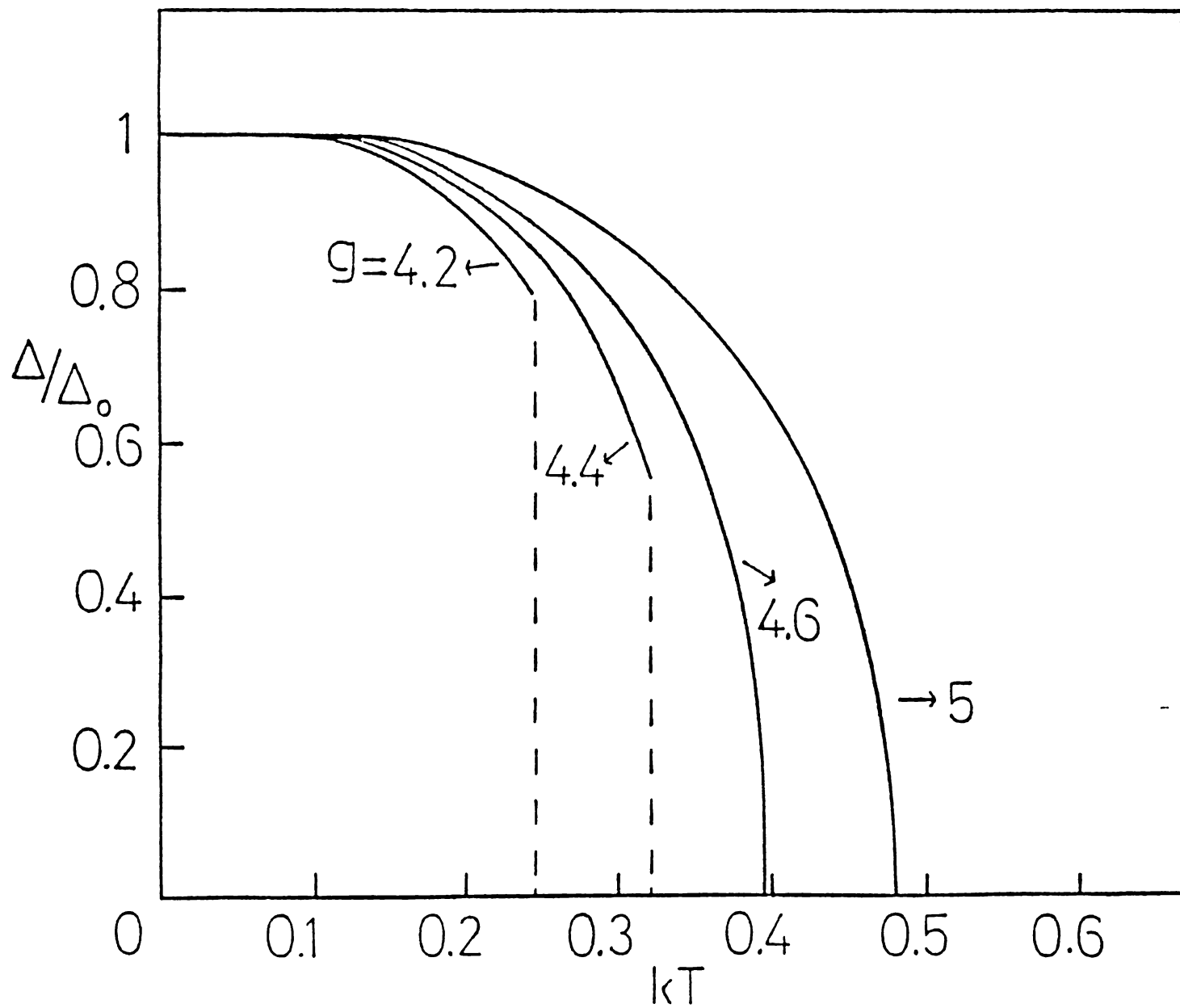


FIGURA 1

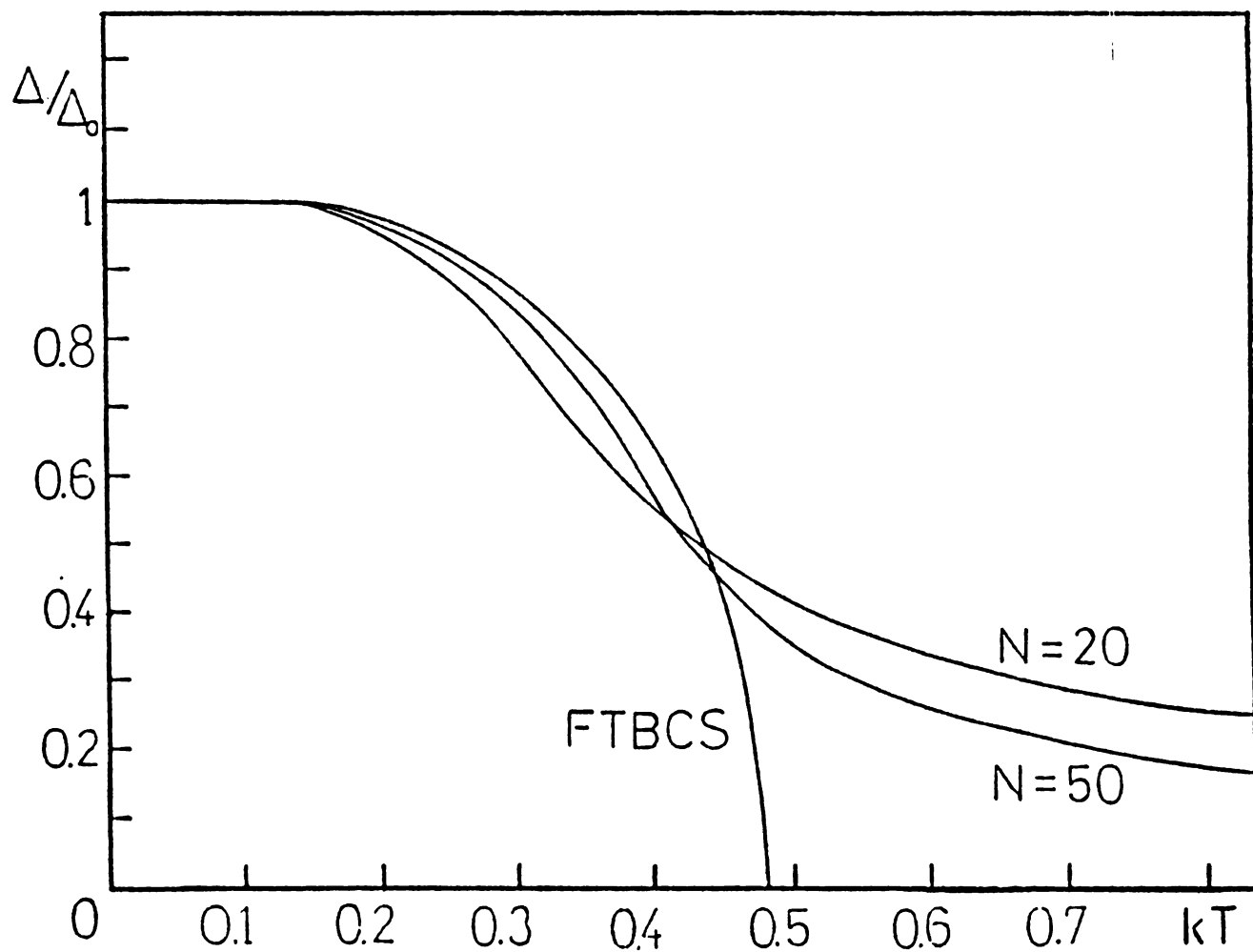


FIGURA 2

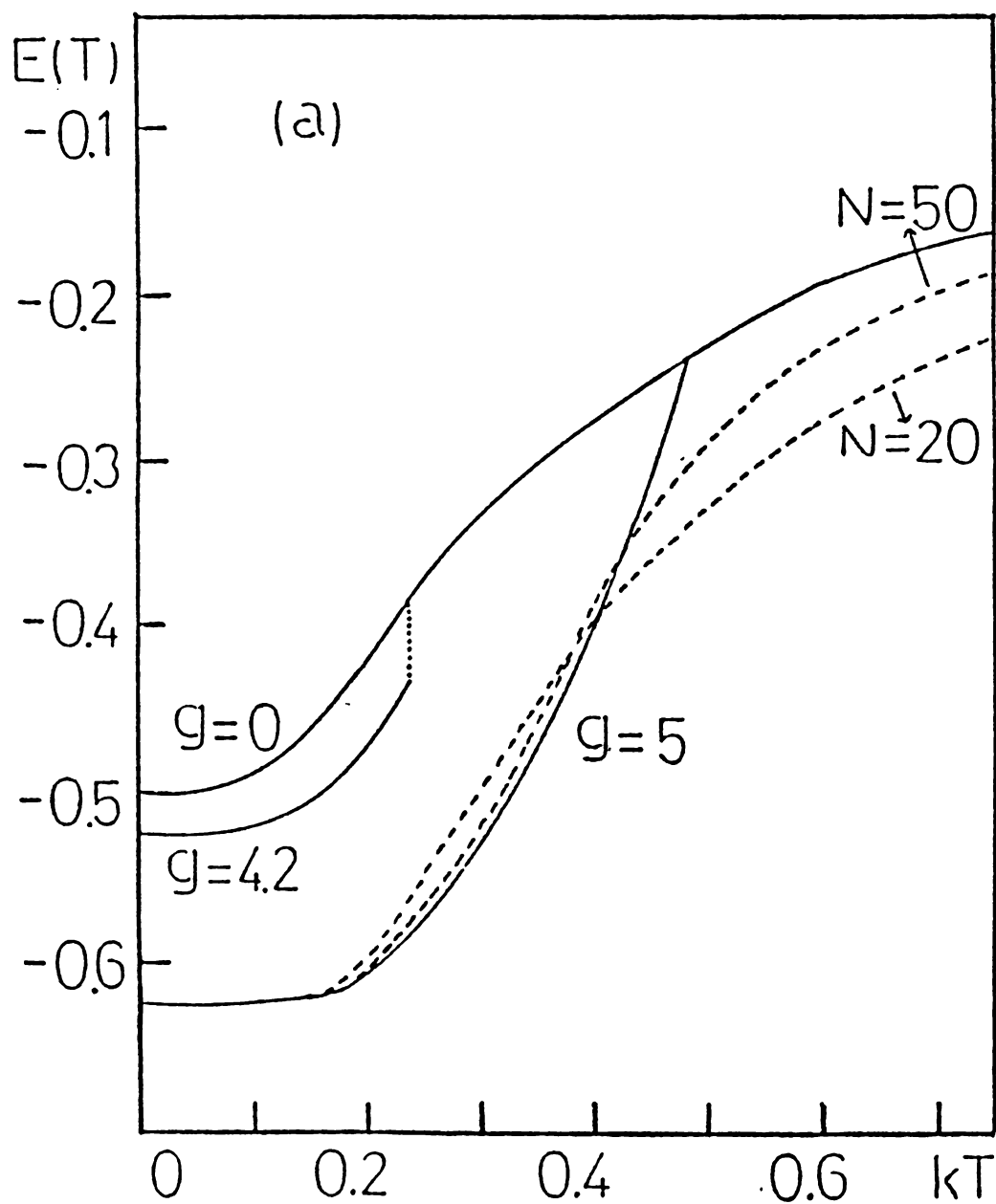


FIGURA 3

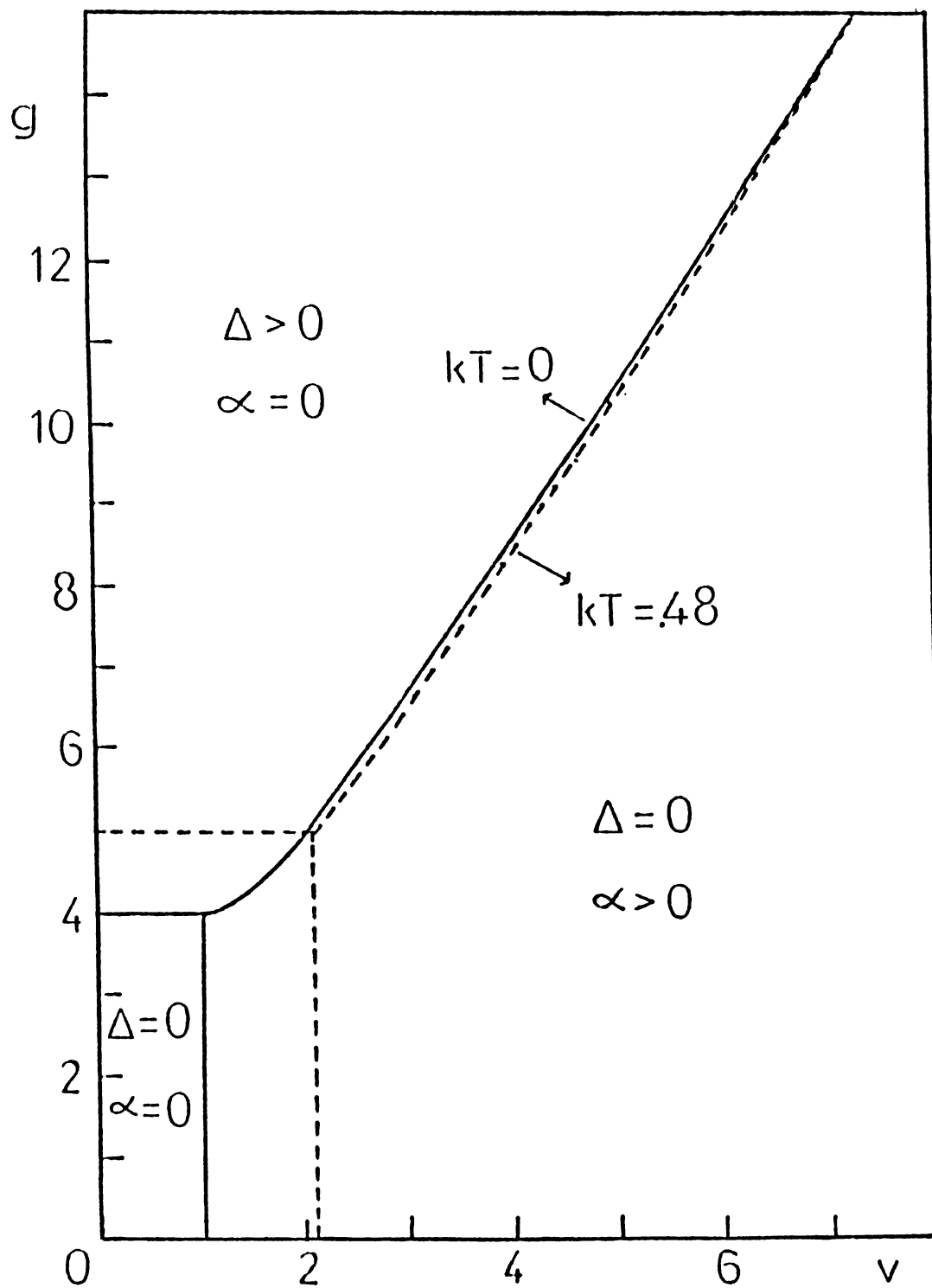


FIGURA 4

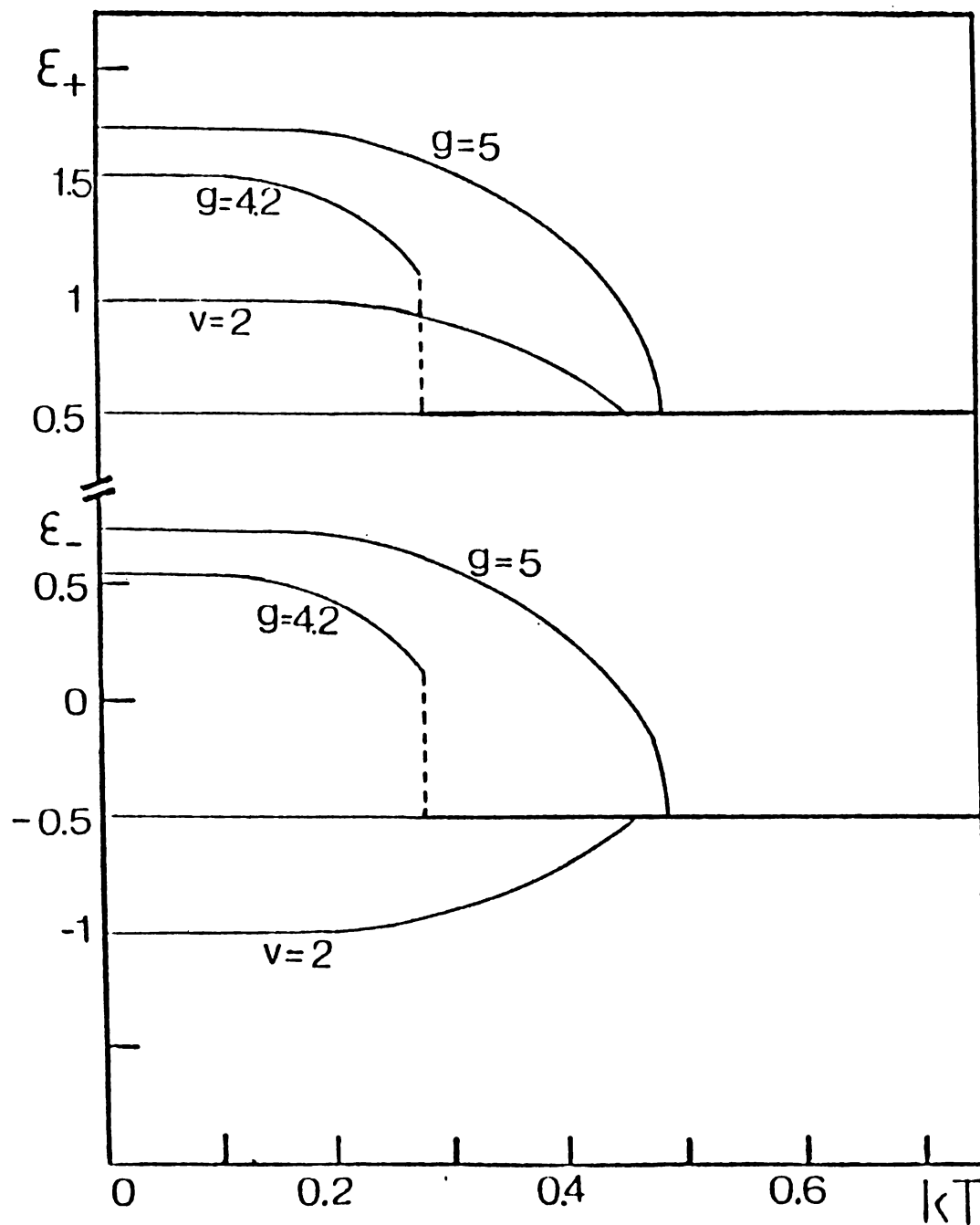


FIGURA 5

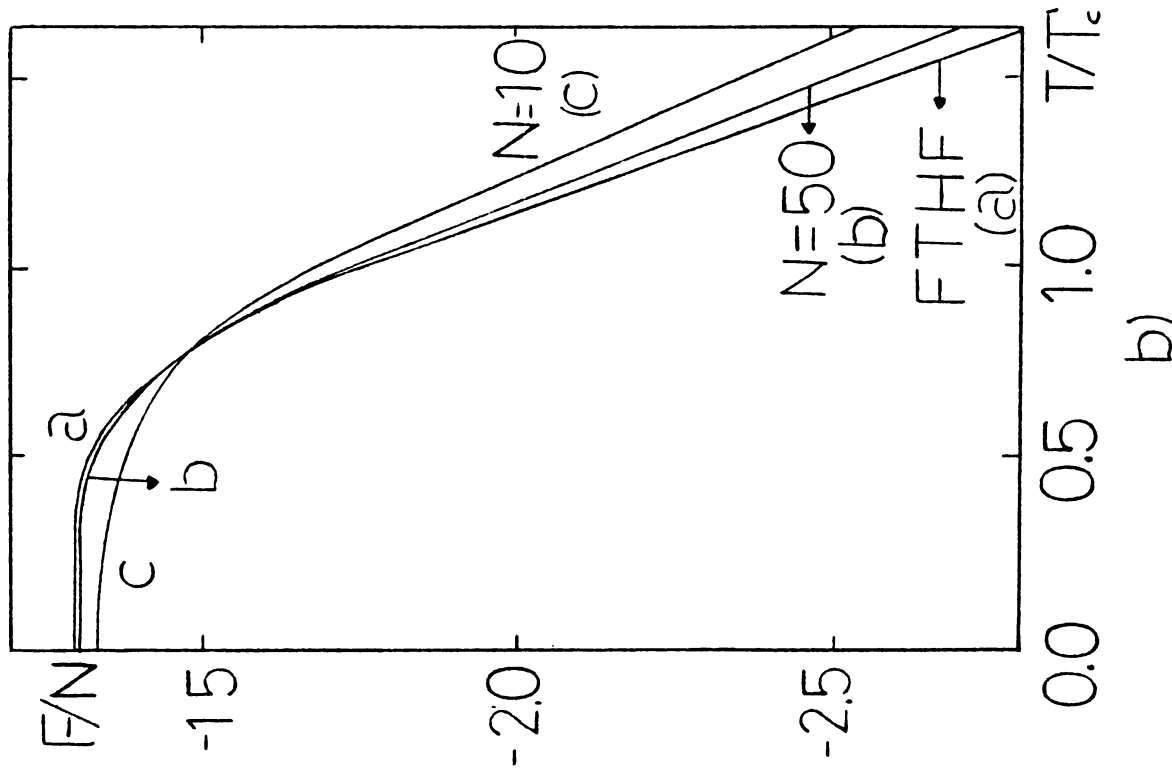
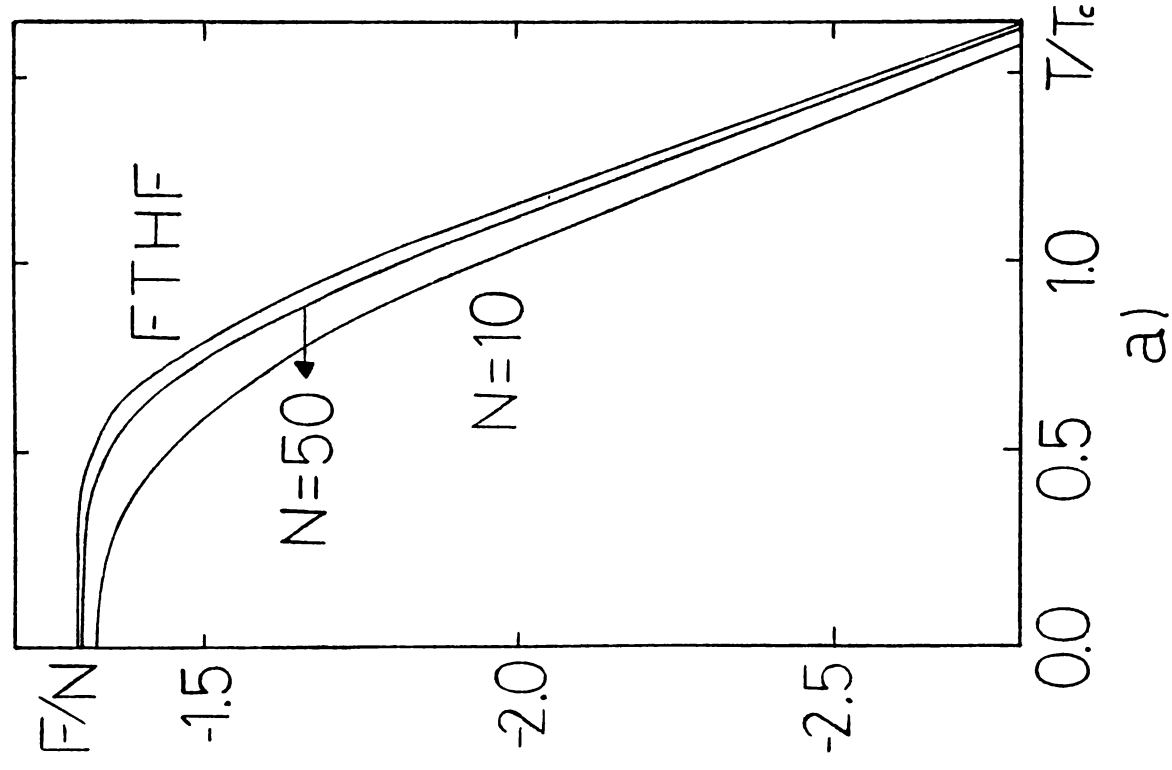


FIGURA 6

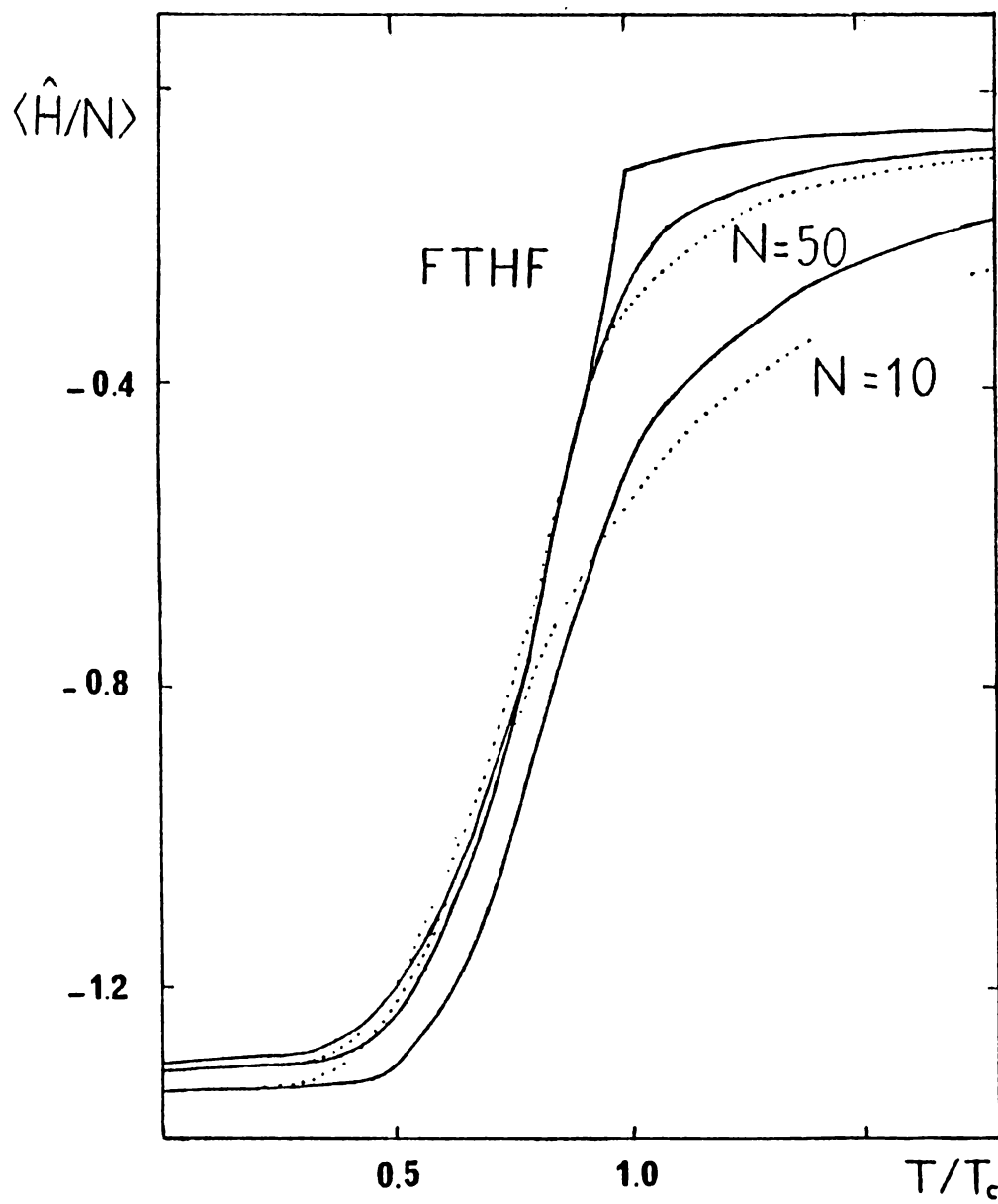


FIGURA 7

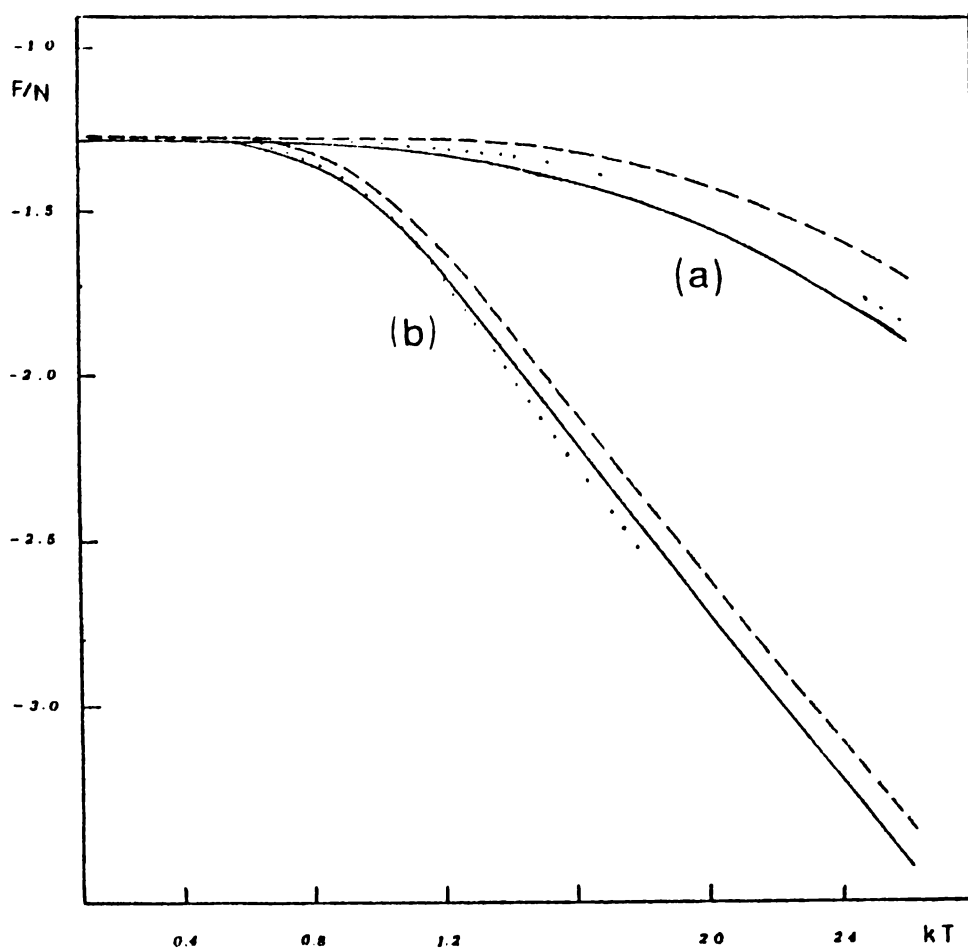


FIGURA 8

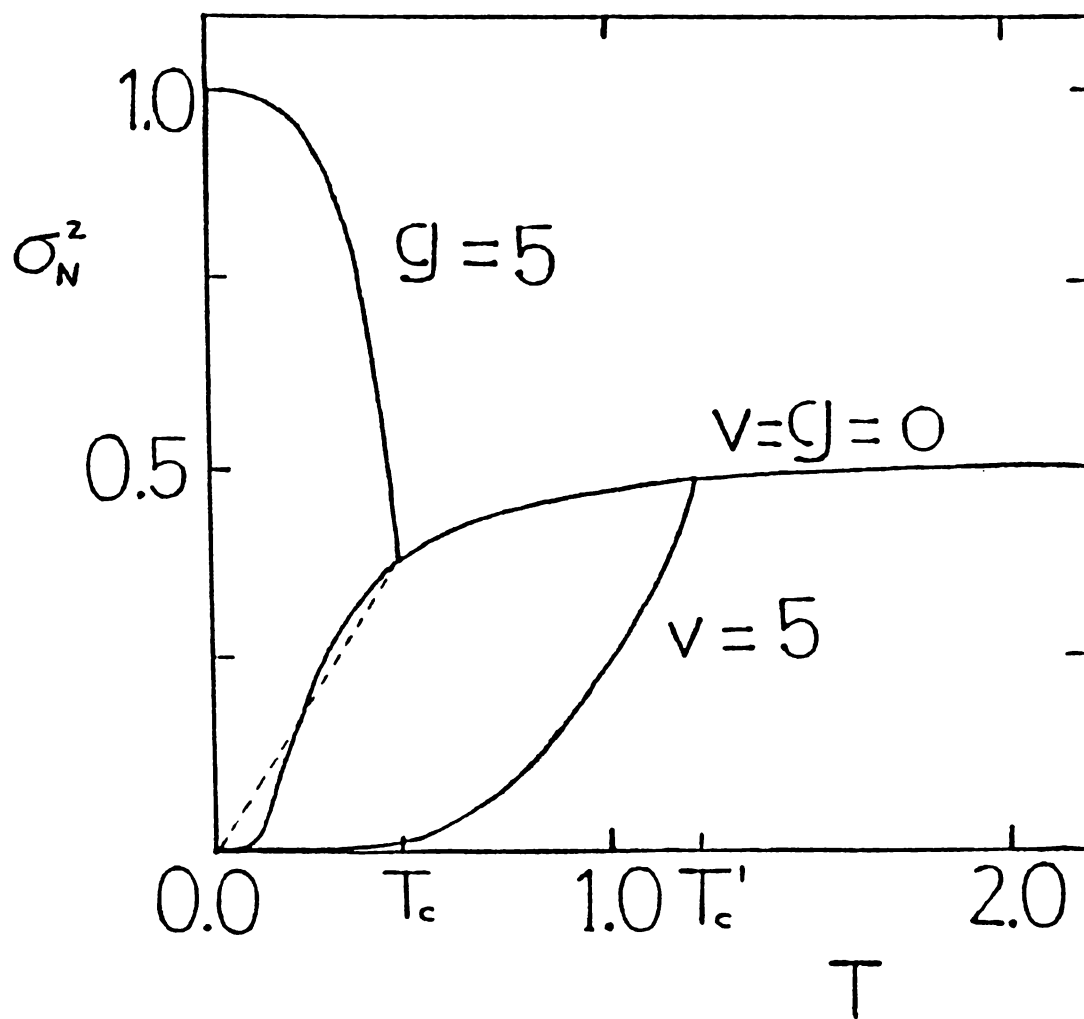


FIGURA 9

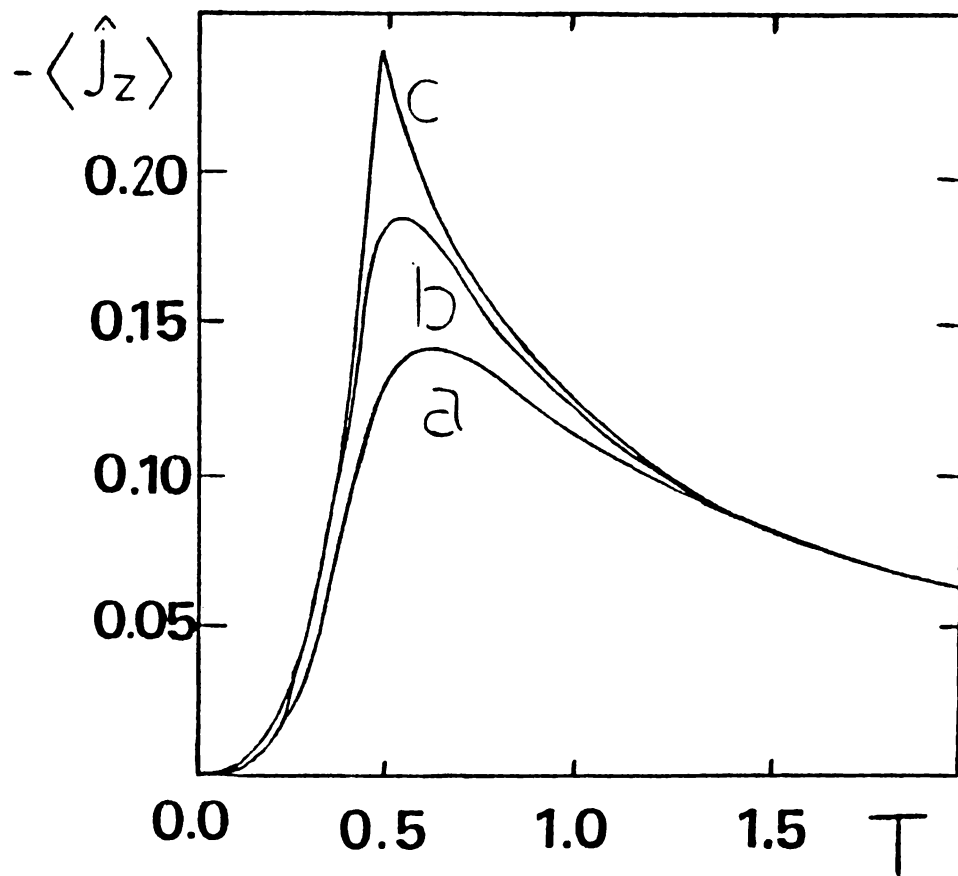


FIGURA 10

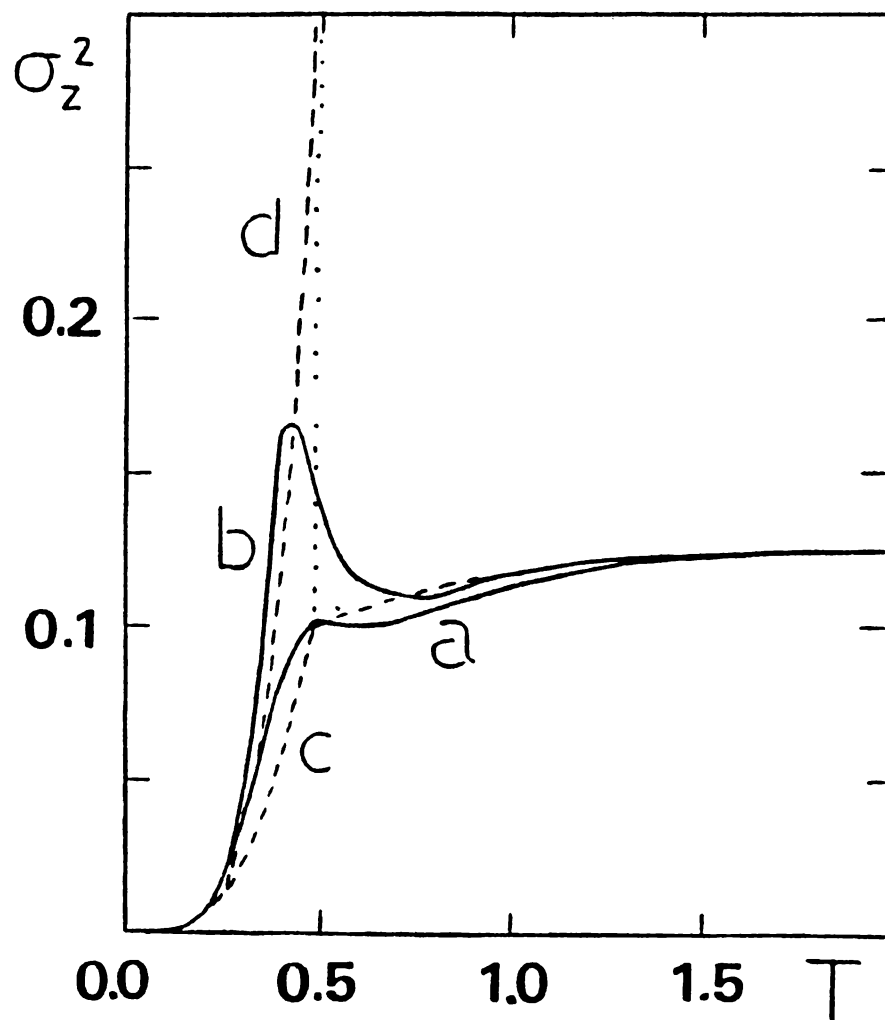


FIGURA 11

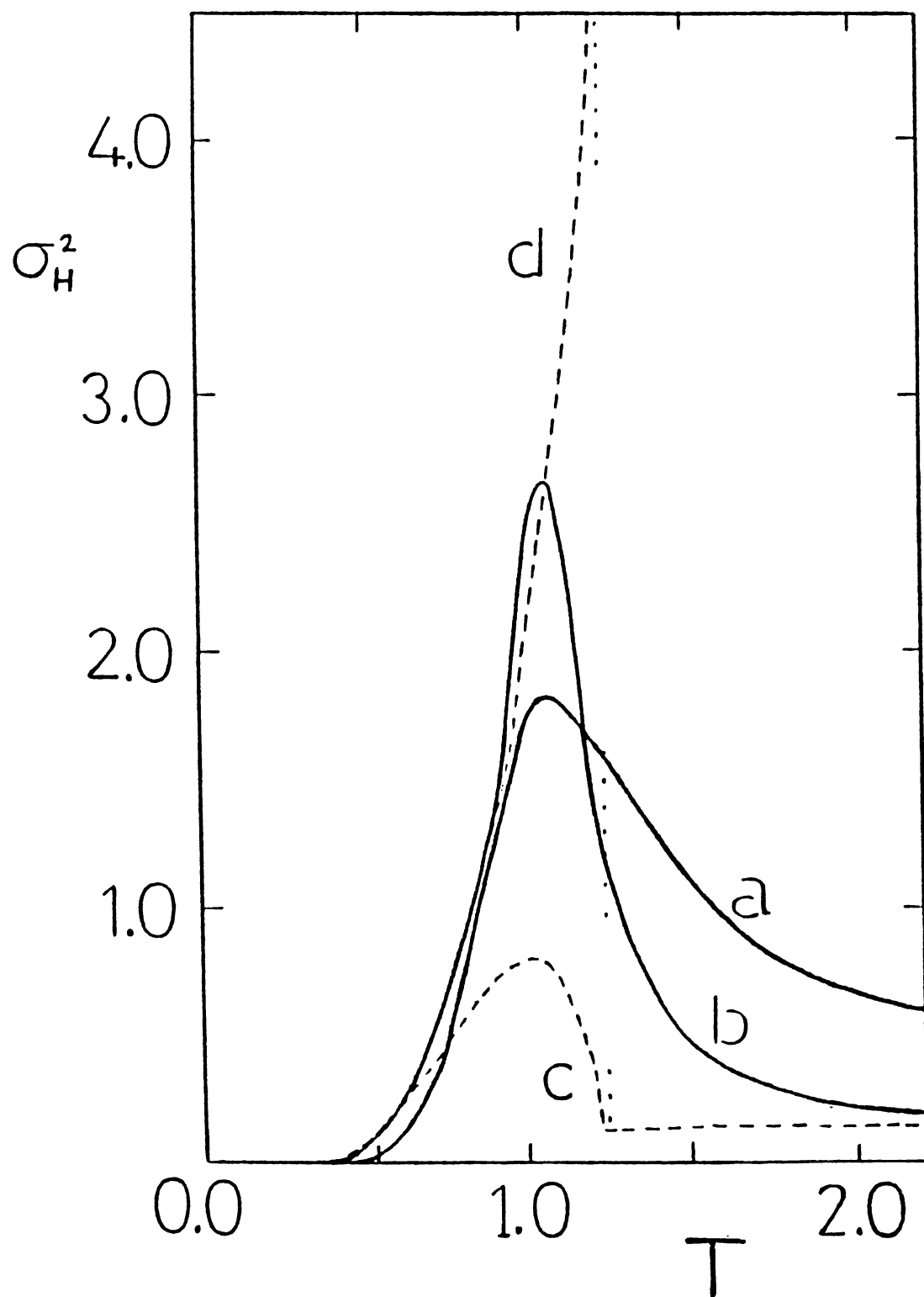


FIGURA 12

CAPITULO IV

SISTEMAS BOSONICOS MONODIMENSIONALES

INTRODUCCION

Abordaremos en este capítulo el estudio estadístico de sistemas bosónicos monodimensionales, en los cuales existe un sólo estado bosónico (de una partícula) accesible. Por lo tanto, a diferencia de los sistemas tratados en el capítulo anterior, el espacio completo de estados accesibles posee dimensión infinita, debido a la posibilidad de un número de ocupación arbitrario de este único estado.

En la representación de coordenadas e impulsos, tal sistema corresponde al de una partícula en una dimensión. A través del uso de la representación bosónica, es posible pues aplicar técnicas propias de problemas de muchos cuerpos para obtener soluciones aproximadas de la ecuación de Schrödinger unidimensional y de la correspondiente función de partición.

En particular, tales sistemas involucran los osciladores anarmónicos cuánticos. El oscilador anarmónico plantea un problema de permanente interés por una gran variedad de motivos, entre ellos su relevancia en el estudio de vibraciones moleculares, y el rol que juega en modelos equivalentes de la teoría cuántica de campos. Como consecuencia de ello, existe una basta literatura sobre el tema. Una pequeña muestra de trabajos relevantes y recientes se da en las referencias 1-10.

El correspondiente problema que se plantea cuando este sistema se encuentra a temperatura finita ha recibido menor atención (véase por ej., ref. 11-13). Dado que el espacio de Hilbert correspondiente posee dimensión infinita, el cálculo

exacto de trazas, (que requiere la determinación de todos los autovalores del operador estadístico), resulta en general complicado. Es por lo tanto deseable poseer un esquema aproximado general apropiado.

Dentro de este contexto, el propósito de este capítulo es introducir y examinar la aproximación autoconsistente bosónica, desarrollada en general en la sección II.6, en el problema monodimensional¹⁴⁻¹⁵, generalizando a temperatura finita tratamientos recientes (por ej. ref. 16-19) realizados a $T = 0$. Se desarrollan también otras aproximaciones alternativas con el objeto de compararlas con la aproximación de campo medio. El capítulo está basado en los trabajos 14-15.

IV.1 LA APROXIMACION TERMICA DE CAMPO MEDIO EN POTENCIALES

SIMETRICOS

Consideremos un sistema monodimensional descrito por el hamiltoniano

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2} \hat{P}^2 + V(\hat{Q}) \\ &= -\frac{1}{2} \{-i(b - b^+)/2^{1/2}\}^2 + V\{(b^+ + b)/2^{1/2}\},\end{aligned}\quad (\text{IV.1.1})$$

donde $V(\hat{Q})$ es el potencial, el cual supondremos que admite un desarrollo en serie de potencias de \hat{Q} , y b , b^+ , los operadores bosónicos de creación y aniquilación usuales,

$$b^+ = (\hat{Q} - i\hat{P})/(2)^{1/2}, \quad b = (\hat{Q} + i\hat{P})/(2)^{1/2}, \quad (\text{IV.1.2})$$

en forma similar a (II.3.57). La energía libre exacta del sistema es (véase (I.2.12))

$$\begin{aligned}F &= \text{Min} \{ \text{Tr}[\hat{\rho} (\hat{H} + T \ln(\hat{\rho}))] \} \\ &= -T \ln \{ \text{Tr}[\exp(-\beta \hat{H})] \},\end{aligned}\quad (\text{IV.1.3})$$

donde el operador densidad exacto que minimiza (IV.1.3) es (véase (I.2.8))

$$\hat{\rho}_{\text{ex}} = \exp\{\lambda_0 - \beta \hat{H}\} \quad (\text{IV.1.4})$$

con $\lambda_0 = \beta F$, y β la inversa de la temperatura T .

Consideraremos en esta sección el caso en que el potencial $V(Q)$ es simétrico respecto a un punto, y posee un sólo mínimo, el cual supondremos situado en el origen. De este modo, $V(Q)$ será una

función par de la coordenada. El operador densidad en la aproximación autoconsistente de c.i. será, siguiendo la sección (II.6), de la forma¹⁴

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 - \beta w b'^+ b'\} , \quad (IV.1.5)$$

donde b'^+ , b' son operadores bosónicos relacionados con los originales (IV.1.2) por medio de una transformación óptima de Bogoliubov. En este caso, a los efectos de minimizar la energía libre es suficiente una transformación real del tipo¹⁴

$$\begin{pmatrix} b' \\ b'^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh(z) & -\sinh(z) \\ -\sinh(z) & \cosh(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ b^+ \end{pmatrix} , \quad (IV.1.6)$$

es decir, con X e Y reales, en la notación de la sección (II.3).

Tanto z como w deben ser determinados por la condición de mínimo (IV.1.3), y son dependientes de la temperatura. Dado que el potencial es simétrico alrededor de su único mínimo, no es necesario incluir traslaciones, pues el valor medio de la coordenada (y del impulso) se anulan. Además, dado que \hat{H} no contiene productos de \hat{P} y \hat{Q} , no es necesario mezclarlos en la transformación (el caso general puede verse en el apéndice A). En estas condiciones, (IV.1.6) constituye una escalización en las coordenadas e impulsos,

$$\hat{Q}' = \exp(-z) \hat{Q} , \quad \hat{P}' = \exp(z) \hat{P} , \quad (IV.1.7)$$

donde \hat{Q}' , \hat{P}' se construyen a partir de b' , b'^+ en forma similar a (IV.1.2). Utilizando las fórmulas (II.3.41-42) se obtiene

$$\langle b'^2 \rangle = \langle (b'^+)^2 \rangle = 0, \quad (\text{IV.1.8})$$

$$f \equiv \langle b'^+ b' \rangle = \text{tr}[\hat{\rho} b'^+ b'] \quad (\text{IV.1.9})$$

$$= [\exp(w/T) - 1]^{-1}, \quad (\text{IV.1.10})$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q}^2 \rangle &= \exp(-2z) \langle \hat{Q}'^2 \rangle \\ &= h(f + \frac{1}{2}), \end{aligned} \quad (\text{IV.1.11})$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}^2 \rangle &= \exp(2z) \langle \hat{P}'^2 \rangle \\ &= (f + \frac{1}{2})/h, \end{aligned} \quad (\text{IV.1.12})$$

donde hemos definido $h = \exp(-2z)$.

Valores medios de operadores de n cuerpos pueden hallarse mediante el teorema de Wick, y es fácil verificar que este puede aplicarse directamente a coordenadas e impulsos. Utilizando el conocido teorema sobre orden normal²⁰ (los dos puntos indican en el presente caso todos los operadores de creación corridos a la derecha)

$$(b^+ + b)^n = \sum_{j=0}^{[n/2]} : (b^+ + b)^{n-2j} : \frac{n!}{(n-2j)! 2^j j!}, \quad (\text{IV.1.13})$$

se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q}^{2n} \rangle &= (h/2)^n \langle (b^+ + b)^{2n} \rangle \\ &= (h/2)^n (f + \frac{1}{2})^n (2n)!/n!, \end{aligned} \quad (\text{IV.1.14})$$

donde en el último renglón de (IV.1.14) hemos utilizado

$$\langle : (b^+ + b)^{2n} : \rangle = (2n)! f^n / n!, \quad (\text{IV.1.15})$$

lo cual se obtiene fácilmente por medio del teorema de Wick. Por

consiguiente,

$$\langle \hat{Q}^{2n+1} \rangle = 0 ,$$

$$\langle \hat{Q}^{2n} \rangle = \langle \hat{Q}^2 \rangle^n \frac{(2n)!}{2^n n!} . \quad (\text{IV.1.16})$$

El factor $(2n)!/(2^n n!)$ es precisamente el número total de posibles contracciones $\langle \hat{Q}^2 \rangle^n$ a partir de $2n$ operadores \hat{Q} . Análogamente, se obtiene

$$\langle \hat{P}^{2n+1} \rangle = 0 ,$$

$$\langle \hat{P}^{2n} \rangle = \langle \hat{P}^2 \rangle^n \frac{(2n)!}{2^n n!} . \quad (\text{IV.1.17})$$

Utilizando la fórmula

$$\frac{2}{(2\pi t)^{1/2}} \int_0^\infty \exp(-x^2/2t) x^{2n} dx = (t/2)^n (2n)!/n! , \quad (\text{IV.1.18})$$

puede obtenerse el resultado general

$$\begin{aligned} \langle V(\hat{Q}) \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{V^{(2n)}(0)}{(2n)!} \langle \hat{Q}^{2n} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{V^{(2n)}(0)}{2^n n!} \langle \hat{Q}^2 \rangle^n \\ &= \frac{2}{(2\pi t)^{1/2}} \int_0^\infty \exp(-x^2/2t) V(x) dx \\ &= \frac{1}{(2\pi t)^{1/2}} \int_0^\infty [\exp(-s/2t) V(s^{1/2})/s^{1/2}] ds , \quad (\text{IV.1.19}) \end{aligned}$$

donde $t = \langle \hat{Q}^2 \rangle$. El valor medio de cualquier función $V(\hat{Q})$ puede expresarse entonces como la transformada de Laplace de $V(s^{1/2})/s^{1/2}$. Una fórmula análoga a (IV.1.19) rige para operadores

que sean funciones del impulso \hat{P} , con el reemplazo $t = \langle \hat{P}^2 \rangle$.

La entropía adquiere la expresión (véase (II.3.17))

$$\begin{aligned} S &= -\text{Tr}[\hat{\rho} \ln(\hat{\rho})] \\ &= (f+1)\ln(f+1) - f\ln(f) . \end{aligned} \quad (\text{IV.1.20})$$

Estamos ahora en condiciones de evaluar F y realizar la correspondiente minimización respecto de h y f . Utilizando (IV.1.14) y (IV.1.11-12),

$$F = \frac{1}{2}\langle \hat{P}^2 \rangle + \langle V(\hat{Q}) \rangle - T[(f+1)\ln(f+1) - f\ln(f)] , \quad (\text{IV.1.21})$$

$$0 = \frac{\partial F}{\partial h} = (f + \frac{1}{2}) \left[\frac{\partial \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial \langle \hat{Q}^2 \rangle} - 1/(2h^2) \right] , \quad (\text{IV.1.22a})$$

$$0 = \frac{\partial F}{\partial f} = T\ln[f/(1+f)] + 1/h . \quad (\text{IV.1.22b})$$

La ecuación (IV.1.22b) vincula a h (z) con f (w), dando como resultado

$$w = 1/h , \quad (\text{IV.1.23a})$$

o sea,

$$f = \{\exp[1/(hT)] - 1\}^{-1} . \quad (\text{IV.1.23b})$$

Por lo tanto, queda para resolver una única ecuación unidimensional en h (o f),

$$1/(2h^2) - \frac{\partial \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial \langle \hat{Q}^2 \rangle} = 0 , \quad (\text{IV.1.24a})$$

o sea,

$$\frac{1}{2} w^2 = \frac{\partial \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial \langle \hat{Q}^2 \rangle} , \quad (\text{IV.1.24b})$$

(ecuación de dispersión) donde $\langle \hat{Q}^2 \rangle$ se vincula con h y f a través de (IV.1.11). La ecuación (IV.1.24) expresa la condición general de autoconsistencia (I.4.8). El exponente de $\hat{\rho}$ debe coincidir (a menos de una constante) con $\beta \hat{h}$, donde \hat{h} es el hamiltoniano de campo medio,

$$\begin{aligned}\hat{h} &= \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle \hat{Q}^2 \rangle} \hat{Q}^2 + \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle \hat{P}^2 \rangle} \hat{P}^2 \\ &= \frac{1}{2} \hat{P}^2 + \frac{\partial \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial \langle \hat{Q}^2 \rangle} \hat{Q}^2 .\end{aligned}\quad (\text{IV.1.25})$$

Por consiguiente, (IV.1.5) y (IV.1.25) conducen a

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} w(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) &= \frac{1}{2} w(h\hat{P}^2 + \hat{Q}^2/h) \\ &= \frac{1}{2} \hat{P}^2 + \frac{\partial \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial \langle \hat{Q}^2 \rangle} \hat{Q}^2 ,\end{aligned}\quad (\text{IV.1.26})$$

lo que implica las ecuaciones (IV.1.23-24). La base óptima (IV.1.6) minimiza F y diagonaliza \hat{h} .

El calor específico es

$$\begin{aligned}C_V &= T \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial T} \\ &= T \ln[(f+1)/f] \frac{df}{dT} ,\end{aligned}\quad (\text{IV.1.27})$$

y puede calcularse a partir de las relaciones

$$\begin{aligned}0 &= \frac{dh}{dT} \left\{ -1/h^3 - \frac{\partial^2 \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial \langle \hat{Q}^2 \rangle^2} (f + \frac{1}{2}) \right\} - \frac{\partial^2 \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial \langle \hat{Q}^2 \rangle^2} h \frac{df}{dT} , \\ \frac{df}{dT} &= f(f+1)/(hT^2) (h + T \frac{dh}{dT}) ,\end{aligned}\quad (\text{IV.1.28})$$

que se obtienen directamente de (IV.1.23-24).

A $T = 0$, f se anula, (o sea, $\lim_{T \rightarrow 0} \frac{w(T)}{T} = \infty$) y se recuperan las fórmulas de la ref. 18, que dan una cota superior a la energía del estado fundamental. La propiedad $f \rightarrow 0$ para $T \rightarrow 0$ puede derivarse en general de (IV.1.12), que puede reescribirse en la forma $\langle \hat{P}^2 \rangle = (f + \frac{1}{2})^2 / \langle \hat{Q}^2 \rangle$. Dado que $\langle V(\hat{Q}) \rangle$ depende sólo de $\langle \hat{Q}^2 \rangle$, la minimización de $\langle \hat{H} \rangle$ implica $f = 0$. Se suponen potenciales $V(\hat{Q})$ que conducen a valores finitos no nulos de $\langle \hat{Q}^2 \rangle$.

En virtud de la transformación (IV.1.6), la presente aproximación autoconsistente será denominada de aquí en más como Hartree Bogoliubov térmico (HBT). La aproximación provee claramente una cota superior a la energía libre exacta, pues equivale a una minimización respecto del conjunto reducido de operadores densidad de la forma (IV.1.5). La expresión (IV.1.19) para los valores de expectación de funciones arbitrarias de la coordenada, equivale al valor medio proporcionado por funciones de onda Gaussianas, aunque con una dispersión t dependiente de la temperatura.

IV.2 EL CASO d-DIMENSIONAL

La generalización de las fórmulas anteriores al caso multidimensional, con un potencial que sólo dependa del radio al origen, es inmediata. Si \hat{H} es de la forma

$$\hat{H} = \sum_i \hat{P}_i^2 / 2m_i + V(\sum_i \hat{Q}_i^2) , \quad (\text{IV.2.1})$$

el correspondiente operador estadístico en la aproximación de HBT es

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 - \beta \sum_i w_i b_i'^+ b_i'\} , \quad (\text{IV.2.2})$$

donde los operadores primados se definen en forma análoga a (IV.1.6). Las sumas sobre i son desde 1 hasta d , siendo d el número de dimensiones. A partir de (IV.2.2) se obtiene,

$$\begin{aligned} \langle b_i'^+ b_j' \rangle &= f_i \delta_{ij} , \\ f_i &= [\exp(w_i/T) - 1]^{-1} , \\ \langle \hat{Q}_1^n \dots \hat{Q}_d^n \rangle &= \langle \hat{Q}_1^n \rangle \dots \langle \hat{Q}_d^n \rangle , \\ S &= \sum_i [(f_i + 1) \ln(f_i + 1) - f_i \ln(f_i)] . \end{aligned} \quad (\text{IV.2.3})$$

Las expresiones para $\langle \hat{Q}_i^2 \rangle$, $\langle \hat{P}_i^2 \rangle$, son idénticas a (IV.1.11) y (IV.1.12). El valor medio del potencial está dado por

$$\langle V(\hat{r}) \rangle = (\prod_i 2\pi t_i)^{-1/2} \int_0^\infty \exp\{-\sum_i x_i^2 / 2t_i\} V(\sum_i x_i^2) dx_1 \dots dx_d , \quad (\text{IV.2.4})$$

donde $\hat{r} = (\sum_i \hat{Q}_i^2)^{1/2}$ y $t_i = \langle \hat{Q}_i^2 \rangle$. La minimización de F conduce a

$w_i = 1/h_i$, y a las d ecuaciones de dispersión

$$1/(2m_i h_i^2) - \frac{\partial \langle V(\hat{r}) \rangle}{\partial t_i} = 0 . \quad (\text{IV.2.5})$$

o sea, $h_i^2 m_i = h_j^2 m_j$. En el caso en que $m_i = m \quad \forall i$, entonces $f_i = f_j = f \quad \forall i, j$, y el valor medio (IV.2.4) puede escribirse en la forma

$$\begin{aligned} \langle V(\hat{r}) \rangle &= \frac{C(d)}{(2\pi t)^{d/2}} \int_0^\infty \exp(-r^2/2t) V(r) r^{d-1} dr \\ &= \frac{C(d)}{(2\pi t)^{d/2}} \int_0^\infty \exp(-s/2t) V((s)^{1/2}) s^{(d/2-1)} ds , \quad (\text{IV.2.6}) \end{aligned}$$

donde $C(d)$ es la integral del ángulo sólido en d dimensiones, $C(d) = 2(\pi)^{d/2}/\Gamma(d/2)$, y $t = \langle \hat{r}^2 \rangle / d = h(f + \frac{1}{2})$. La entropía es d veces la del caso unidimensional,

$$S = d [(f+1)\ln(f+1) - f\ln(f)] . \quad (\text{IV.2.7})$$

Se obtiene entonces una única ecuación de dispersión

$$1/(2h^2) - \frac{\partial \langle V(\hat{r}) \rangle / d}{\partial t} = 0 , \quad (\text{IV.2.8})$$

(hemos supuesto $m = 1$), por lo que el tratamiento es análogo al caso unidimensional, con un potencial efectivo (par) $V_{\bullet f}(r) = V(r) r^{d-1} C(d) / [2(2\pi t)^{(d-1)/2}]$. La aproximación es obviamente exacta en el caso $V(\hat{r}) = \alpha \hat{r}^2$ ($\alpha > 0$).

IV.3 COTAS SUPERIORES ALTERNATIVAS

Introduciremos en esta sección ciertas cotas superiores (no perturbativas) a la energía libre¹⁴, con el objeto de situar la aproximación de HBT dentro de una perspectiva más clara. Partiendo de la desigualdad²¹

$$\langle n | \exp(-\beta \hat{H}) | n \rangle \geq \exp(-\beta \langle n | \hat{H} | n \rangle) , \quad (\text{IV.3.1})$$

que es válida para cualquier estado normalizado $|n\rangle$, y en general, para cualquier función de \hat{H} cóncava hacia arriba, es posible obtener una cota superior inmediata si sustituimos

$$|n\rangle = \frac{(b'^+)^n}{(n!)^{1/2}} |0\rangle , \quad (\text{IV.3.2})$$

de modo que

$$F_{\text{ex}} \leq -T \ln \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \exp[-\beta \langle n | \hat{H} | n \rangle] \right\} \quad (\text{IV.3.3})$$

Una posibilidad consiste en elegir el vacío $|0\rangle$ y el operador b'^+ como aquellos correspondientes a la solución de HB para $T=0$. Sin embargo, esta aproximación provee buenos resultados sólo para temperaturas pequeñas. No obstante, el método puede ser mejorado si se utiliza la base de HBT para la correspondiente temperatura. En realidad, la base de HBT se encuentra muy próxima a la base óptima de c.i. que minimiza (IV.3.3). La cota superior así obtenida resulta en general mejor que la de HBT, aunque requiere mucho mayor trabajo numérico, debido a la evaluación de $\langle n | V(\hat{Q}) | n \rangle$. Es necesario en general desarrollar el potencial en serie de potencias y hacer uso de la relación

$$\langle n | \hat{Q}^{2m} | n \rangle = [(2m)!/m!] h^m 2^{-m} \sum_{j=0}^m 2^{-j} \begin{pmatrix} m \\ j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n \\ m-j \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.3.4})$$

que puede obtenerse directamente a partir de (IV.1.13).

Las cotas anteriores (incluso la de HBT) son mejores que las cotas del tipo clásicas. La aproximación clásica se obtiene al suponer que la interacción $V(\hat{Q})$ conmuta con \hat{P}^2 ,

$$\begin{aligned} \langle Q | \exp\{-\beta \hat{H}\} | Q \rangle &\simeq \exp\{-\beta V(Q)\} \langle Q | \exp\{-\frac{1}{2} \beta \hat{P}^2\} | Q \rangle \\ &= \exp\{-\beta V(Q)\} \left[\frac{T}{2\pi} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (\text{IV.3.5})$$

La aproximación clásica es válida si la variación de $V(Q)$ en $\Delta Q = T^{-1/2}$ (en unidades corrientes, $\Delta Q = h/(mkT)^{1/2}$) es pequeña, es decir, a temperaturas suficientemente altas. La aproximación (IV.3.5) puede ser mejorada dentro de los lineamientos anteriores, utilizando en (IV.3.1) los estados coherentes (véase Ap. II.B) en lugar de $|n\rangle$. En la representación de Bargmann, el operador identidad puede escribirse como

$$\begin{aligned} I &= \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |z\rangle \langle z| dz/\pi, \end{aligned} \quad (\text{IV.3.6})$$

donde $dz = dx dy$ y $|z\rangle$ el estado coherente normalizado (véase (II.B.14-15))

$$\begin{aligned} |z\rangle &= \exp\left(-\frac{1}{2} |z|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{(n!)^{1/2}} |n\rangle \\ &= \exp\{i(p_0 \hat{Q} - q_0 \hat{P})\} |0\rangle, \end{aligned} \quad (\text{IV.3.7})$$

donde $z = (q_0 + i p_0/w)/C$, con $C=(2/w)^{1/2}$, siendo w un parámetro variacional a determinar. $|z\rangle$ es el estado fundamental de un oscilador armónico desplazado, en las coordenadas e impulsos, de frecuencia w ($|0\rangle$ es el vacío correspondiente a $p_0 = q_0 = 0$). Para esta elección de estados, la desigualdad (IV.3.3) se traduce en

$$\begin{aligned}
 F &\leq -T \ln \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\beta \langle z | \hat{H} | z \rangle\} dq_0 dp_0 / (2\pi) \right] = \\
 &-T \ln \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\beta(p_0^2/2 - w/4)\} \exp\{-\beta \langle 0 | V(\hat{Q}+q_0) | 0 \rangle\} dq_0 dp_0 / (2\pi) \right] = \\
 &-T \ln \left[\left[\frac{T}{2\pi} \right]^{1/2} \exp\{-\beta w/4\} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\beta \langle 0 | V(\hat{Q}+q_0) | 0 \rangle\} dq_0 \right]. \quad (\text{IV.3.8})
 \end{aligned}$$

La cota (IV.3.8) coincide formalmente con el tratamiento clásico (IV.3.5), con el reemplazo de $V(\hat{Q})$ por el potencial efectivo

$$V_{\text{ef}} = w/4 + \langle 0 | V(\hat{Q}+q_0) | 0 \rangle = w/4 + \left[\frac{w}{\pi} \right]^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-wx^2\} V(x+q_0) dx. \quad (\text{IV.3.9})$$

La expresión (IV.3.8) debe a su vez ser minimizada respecto de w para obtener la cota mínima. No obstante, la cota (IV.3.8) no es exacta aún para el oscilador armónico, que es el caso 'no perturbado' de la aproximación de HBT y de (IV.3.3). La energía libre exacta es en este caso (w es la frecuencia del oscilador)

$$F_{\text{ex}} = F_{\text{HBT}} = T \ln[1 - \exp(-\beta w)] + w/2, \quad (\text{IV.3.10})$$

y las aproximaciones (IV.3.5) y (IV.3.8) son respectivamente

$$F_1 = -T \ln(T/w) , \quad (IV.3.11)$$

$$F_2 = -T \ln(T/w) + w/2 . \quad (IV.3.12)$$

Ambas fórmulas (IV.3.11-12) constituyen expresiones asintóticas para $T \rightarrow \infty$ de la solución exacta (IV.3.10).

IV.4 EL POTENCIAL λQ^{2n}

Examinaremos en esta sección el caso en que

$$V(\hat{Q}) = \frac{1}{2}\gamma \hat{Q}^2 + \lambda \hat{Q}^{2n}, \quad (\text{IV.4.1})$$

donde por el momento elegiremos $\gamma > 0$, $\lambda > 0$, de modo que el potencial posea un sólo mínimo en el origen. El hamiltoniano (IV.1.1) representa en este caso un oscilador armónico cuántico con una 'perturbación' $\lambda \hat{Q}^{2n}$. Aplicando las fórmulas (IV.1.11-16) se obtiene

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{2}(\langle \hat{P}^2 \rangle + \gamma \langle \hat{Q}^2 \rangle) + \lambda' \langle \hat{Q}^2 \rangle^n - TS \\ &= \frac{1}{2}(f + \frac{1}{2})(1/h + \gamma h) + \lambda' (h/2)^n (f + \frac{1}{2})^n - T[(f+1)\ln(f+1) - f\ln(f)], \end{aligned} \quad (\text{IV.4.2})$$

donde $\lambda' = \lambda(2n)!/n!$. La ecuación (IV.1.24a) se convierte en este caso en

$$-1/h^2 + \gamma + n\lambda' [\frac{1}{2}h(f + \frac{1}{2})]^{(n-1)} = 0, \quad (\text{IV.4.3})$$

donde f depende de h a través de (IV.1.23b). Para $T \rightarrow \infty$, $f \rightarrow \infty$, mientras que $h \rightarrow 0$ si $n > 1$. Se obtienen las expresiones asintóticas

$$\begin{aligned} h &= c T^{(1-n)/(2n)}, \\ f + \frac{1}{2} &= hT = c T^{(n+1)/(2n)}, \end{aligned} \quad (\text{IV.4.4})$$

donde $c = [(2\lambda'n)^{(1/n)}/2]^{-1/2}$. Utilizando (IV.4.4) se obtienen los límites asintóticos

$$\langle \frac{1}{2} \hat{P}^2 \rangle = T/2 , \quad (IV.4.5)$$

$$\langle \hat{Q}^2 \rangle = c^2 T^{1/n} , \quad \langle \hat{Q}^{2n} \rangle = T/2\lambda n ,$$

$$S = 1 + \ln(f) = (n+1)/(2n) \ln(T) ,$$

$$C_V = (n+1)/(2n) . \quad (IV.4.6)$$

Las expresiones anteriores coinciden con los resultados asintóticos exactos (obtenidos, por ej., con la función de partición clásica), corroborando que HBT es exacto en el límite clásico. Cabe mencionar que las fórmulas (IV.4.5-6) son también válidas para cualquier $V(\hat{Q})$ que sea un polinomio de grado $2n$, dado que el comportamiento a altas temperaturas es dominado por el término de grado más alto.

A bajas temperaturas, el número de ocupación tiende a 0 en la forma

$$f = \exp\{-1/(h_0 T)\} , \quad (IV.4.7)$$

y el calor específico como

$$C_V = \exp\{-1/(h_0 T)\} / (h_0 T)^2 , \quad (IV.4.8)$$

donde h_0 es el valor de h correspondiente a $T = 0$. Las dos fórmulas anteriores corresponden a un sistema de dos niveles separados por energía $w = 1/h_0$.

La aplicación de la cota (IV.3.3) al presente caso da como resultado

$$F \leq -T \ln \left[\sum_{n=0}^{\infty} \exp\{-\beta[\langle n | \hat{P}^2 / (2h) + V(h^{1/2} \hat{Q}) | n \rangle]\} \right] , \quad (IV.4.9)$$

donde $\langle n | \hat{P}^2 | n \rangle = \langle n | \hat{Q}^2 | n \rangle = n + \frac{1}{2}$. Para el potencial (IV.4.1), con $n=4$ y $\gamma = 1$, se obtiene

$$F \leq -T \ln \left[\sum_{n=0}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \beta \left[\frac{1}{2} (1/h + h + 3\lambda h^2) + n(h + 1/h + 6\lambda h^2) + n(n-1)3\lambda h^2 \right] \right\} \right]. \quad (\text{IV.4.10})$$

La cota (IV.4.10) corresponde a la de un operador estadístico que si bien es diagonal en la base de c.i. (IV.3.2), incluye términos de dos o más cuerpos en el exponente. El valor de h es en principio el que minimiza (IV.4.10), aunque se encuentra muy próximo al valor dado por HBT.

Por su parte, las cotas clásicas (IV.3.5,8) son aún más difíciles de evaluar para el potencial (IV.4.1), a pesar de que poseen una exactitud menor que HBT y (IV.4.9).

Es importante remarcar que no existe ninguna restricción para los valores de λ en la aproximación de HBT (y también en (IV.3.3)) a diferencia de lo que ocurre en los métodos perturbativos. Por ej., en el caso $\lambda \hat{Q}^4$, los tratamientos perturbativos divergen para $\lambda \geq 2$ ^{1,11}.

Resultados numéricos son presentados en las tablas I y II para los casos $\lambda \hat{Q}^4$ y $\lambda \hat{Q}^6$, donde los resultados de HBT para diversas magnitudes termodinámicas se comparan con las cotas alternativas de la sección IV.3 y con los resultados exactos (véase sección IV.9). En el caso $n=2$, los resultados han sido comparados también con aquellos de la ref. 11, en la cual se utilizan los autovalores de Hioe y Montroll¹, obtenidos en base a la representación de Bargmann de la ecuación de Schrödinger (método válido sólo para $\lambda \leq 2$, y en el caso $\lambda \hat{Q}^4$). No obstante, los resultados obtenidos de este modo no constituyen una cota

superior a la energía libre.

Los resultados proporcionados por HBT pueden considerarse muy satisfactorios (véase fig. 1), especialmente en lo que respecta a $E = \langle \hat{H} \rangle$ y C_v . La cota (IV.3.3) utilizando la base de HB a $T=0$ es levemente superior sólo a muy bajas temperaturas. No obstante, al utilizarse la base de HBT para la correspondiente temperatura, la cota mejora de manera considerable. Obviamente, a $T=0$ las tres cotas anteriores coinciden con la aproximación de HB.

IV.5 APLICACION A POTENCIALES ASIMETRICOS GENERALES

En las secciones anteriores, la aproximación autoconsistente de HBT ha sido aplicada a potenciales $V(\hat{Q})$ simétricos alrededor de su único mínimo. En estos casos, el valor medio de la coordenada \hat{Q} se anula, y el campo medio de Hartree-Bogoliubov es gobernado por un único parámetro, la dispersión $\langle \hat{Q}^2 \rangle$ dependiente de la temperatura. Cambios en las constantes de acoplamiento o en la temperatura inducen una respuesta 'suave' del campo de HBT, y no son de esperar fenómenos críticos dentro de la aproximación.

En esta sección consideraremos potenciales $V(\hat{Q})$ que exhiban dos o más extremos, y que no posean necesariamente un centro de simetría. El problema físico correspondiente se torna más atrayente, convirtiéndose el valor medio de la coordenada $\langle \hat{Q} \rangle$ en un nuevo parámetro variacional¹⁵. Además, el campo autoconsistente de Hartree puede exhibir diferentes comportamientos en los distintos extremos del potencial, lo que puede dar lugar a varias soluciones simultáneas de campo medio y correspondientes transiciones de fase. Este hecho no ha sido estudiado, aún a $T = 0$, en las ref. 16-19.

La generalización del formalismo de la sección IV.1 es inmediata. El operador densidad es nuevamente de la forma (IV.1.5), pero la transformación de Bogoliubov debe incluir ahora traslaciones¹⁵,

$$\begin{pmatrix} b' \\ b'^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh(z) & \sinh(z) \\ \sinh(z) & \cosh(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ b^+ \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d \\ d \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.5.1})$$

donde la constante real d incorpora una traslación sólo en la coordenada. Se obtiene, en lugar de (IV.1.7),

$$\begin{aligned}\hat{Q}' &= e^{-Z} (\hat{Q} - q) , \\ \hat{P}' &= e^Z \hat{P} ,\end{aligned}\tag{IV.5.2}$$

$$q = -(2)^{1/2} d e^Z ,$$

y

$$\begin{aligned}\langle \hat{Q} \rangle &= q , \quad \langle \hat{Q}^2 \rangle = h(f + \frac{1}{2}) + q^2 , \\ \langle \hat{Q}^n \rangle &= \sum_{m=0}^{[n/2]} n! q^{(n-2m)} t^{2m} / [(n-2m)! 2^m] ,\end{aligned}\tag{IV.5.3}$$

$$\langle V(\hat{Q}) \rangle = (2\pi t)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-(x-q)^2/2t\} V(x) dx ,\tag{IV.5.4}$$

donde hemos definido la fluctuación $t = \langle \hat{Q}^2 \rangle - \langle \hat{Q} \rangle^2 = h(f + \frac{1}{2})$, en forma similar a (IV.1.19). (IV.5.4) representa una distribución Gaussiana centrada en $x=q$, y constituye la transformada de Poisson de $V(x)$. Las expresiones para los valores medios de funciones del impulso permanecen obviamente iguales.

La traslación q es un nuevo parámetro variacional en adición a h (o t) y f . La minimización respecto de f da como resultado la misma expresión (IV.1.23). La condición de mínimo sobre t y q conduce por su parte al sistema de ecuaciones

$$-1/(2h^2) + \frac{\partial \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial t} = 0 ,\tag{IV.5.5a}$$

$$\frac{\partial \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial q} = 0 .\tag{IV.5.5b}$$

Las ecuaciones (IV.5.5) se encuentran acopladas debido a que $\langle V(\hat{Q}) \rangle$ depende conjuntamente de t y q . Nuevamente pueden verificarse las condiciones de autoconsistencia. El hamiltoniano de campo medio posee en el presente caso términos lineales en \hat{Q} ,

$$\begin{aligned}\hat{h} &= \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle \hat{P}^2 \rangle} \hat{P}^2 + \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle \hat{Q}^2 \rangle} \hat{Q}^2 + \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle \hat{Q} \rangle} \hat{Q} \\ &= \frac{1}{2} \hat{P}^2 + \frac{\partial \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial t} (\hat{Q} - q)^2 + \frac{\partial \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial q} \hat{Q} - q^2 \frac{\partial \langle V(\hat{Q}) \rangle}{\partial t} .\end{aligned}\quad (\text{IV.5.6})$$

Por su parte, (IV.1.5) y (IV.5.2) conducen a

$$\hat{h} = \frac{w}{2} (\hat{Q}^2 + \hat{P}^2) = \frac{w}{2} (h\hat{P}^2 + (\hat{Q} - q)^2/h) \quad (\text{IV.5.7})$$

lo que implica $w = 1/h$ y el sistema (IV.5.5). La ecuación (IV.5.5b) implica que no existen términos lineales en $\hat{Q} - q$, es decir, que \hat{h} no conecta el nuevo vacío con el estado de un bosón.

La adición de q como parámetro variacional equivale a la inclusión del 'observable' \hat{Q} en el exponente de $\hat{\rho}$, o sea, a una ampliación de la descripción, en la filosofía de la sección I.4. Tal inclusión, que rompe con la simetría de paridad, es imprescindible para detectar la presencia de términos impares en el potencial, así también como posibles mínimos no centrados en el origen.

IV.6 EL POTENCIAL ANARMONICO GENERAL

En esta sección estudiaremos el caso de un potencial

$$V(\hat{Q}) = \frac{1}{2}\gamma \hat{Q}^2 + \delta \hat{Q}^3 + \lambda \hat{Q}^4, \quad (\text{IV.6.1})$$

de modo que el hamiltoniano del sistema puede escribirse en la forma

$$\hat{H} = \lambda^{1/3} \left\{ \frac{1}{2}(\hat{P}'^2 + \gamma' \hat{Q}'^2) + \delta' \hat{Q}'^3 + \hat{Q}'^4 \right\}, \quad (\text{IV.6.2})$$

donde $\hat{P}' = \lambda^{-1/6} \hat{P}$, $\hat{Q}' = \lambda^{1/6} \hat{Q}$, $\delta' = \lambda^{-5/6} \delta$, $\gamma' = \lambda^{-2/3} \gamma$, $\lambda > 0$.

Las coordenadas Q , Q' , corresponden a un sistema con el origen situado en uno de los extremos del potencial. El potencial (IV.6.1) exhibe tres extremos para $\gamma < 9\delta^2/16\lambda$ (dos mínimos y un máximo) y en caso contrario un sólo mínimo. El empleo de las ecuaciones (IV.5.3-5) conduce a

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{2} \left[\left(f + \frac{1}{2} \right)^2 / t + \gamma (t + q^2) \right] + \delta (q^3 + 3tq) + \lambda (q^4 + 6q^2 t + 3t^2) \quad (\text{IV.6.3})$$

$$\frac{\partial F}{\partial q} = \gamma q + 3\delta(q^2 + t) + 4\lambda(q^3 + 3qt) = 0, \quad (\text{IV.6.4})$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{1}{2} \left[\gamma - \left(f + \frac{1}{2} \right)^2 / t^2 \right] + 3\delta q + 6\lambda(q^2 + t) = 0,$$

donde hemos empleado como parámetro variacional a t en lugar de h con el objeto de simplificar las expresiones. Utilizando (IV.6.4) se obtiene

$$t = -(\gamma q + 4\lambda q^3 + 3\delta q^2) / (12\lambda q + 3\delta), \quad (\text{IV.6.5a})$$

$$\left(f + \frac{1}{2} \right)^2 = t^2 (\gamma + 12\lambda q^2 + 6\delta q) + 12\lambda t^3, \quad (\text{IV.6.5b})$$

de modo que queda por resolver una única ecuación,

$$f - \{\exp[(f + \frac{1}{2})/(tT)] - 1\}^{-1} = 0, \quad (\text{IV.6.6})$$

donde tanto f como t se expresan en función de q por medio de (IV.6.5). De acuerdo a los valores relativos de λ , δ , y γ , varias raíces pueden emerger de (IV.6.6). Consideraremos en las secciones siguientes dos situaciones específicas.

Al igual que en el caso de la sección IV.1, la aproximación de HBT proporciona los correctos primeros términos asintóticos de magnitudes termodinámicas en el límite clásico $T \rightarrow \infty$. Dado que a altas temperaturas el comportamiento del sistema está gobernado por el término cuártico, las expresiones asintóticas de la sección IV.4 permanecen válidas en el presente contexto, salvo para la traslación q , cuyo comportamiento asintótico esta dado por

$$q \simeq \frac{\delta}{4\lambda} [-1 + (\gamma - \delta^2/2\lambda)/(12\lambda T)^{1/2}] . \quad (\text{IV.6.7})$$

Dado que $\lambda \hat{Q}^4 + \delta \hat{Q}^3 = \lambda (\hat{Q} + \delta/4\lambda)^4$ más términos de menor grado, el valor límite de q es $-\delta/4\lambda$.

IV.7 EL POTENCIAL BIESTABLE

Consideraremos en detalle el caso en que el potencial exhibe dos mínimos de igual profundidad. Esto sucederá cuando a) $\gamma < 0$ y $\delta=0$, o b) $\gamma = \delta^2/2\lambda$. En ambos casos se trata de un potencial simétrico (alrededor del origen o de $-\delta/4\lambda$ respectivamente). Para el caso a), las ecuaciones (IV.5.5) se reducen a

$$q[\gamma + 4\lambda(q^2+3t)] = 0 , \quad (IV.7.1)$$

$$(f+\frac{1}{2})^2 - t^2[12\lambda(t+q^2) + \gamma] = 0. \quad (IV.7.2)$$

Notemos que una solución simétrica ($q=0$) existe siempre. Sin embargo, una solución desplazada (degenerada), que rompe con la simetría del potencial es también posible para

$$q = \pm(-\gamma/4\lambda - 3t)^{1/2} , \quad (IV.7.3)$$

con t raíz de

$$(f+\frac{1}{2})^2 + 2t^2(12\lambda t + \gamma) = 0 . \quad (IV.7.4)$$

Para un dado f real, soluciones reales positivas de (IV.7.3) existen sólo si $-\gamma > (486)^{1/3}[(f+\frac{1}{2})\lambda^{1/3}]^2$. Así, a $T=0$, la solución desplazada es posible si

$$\gamma < -(243/2)^{1/3}\lambda^{2/3} \equiv \gamma_0 , \quad (IV.7.5)$$

En este caso, existen cinco soluciones estacionarias de HBT: dos mínimos degenerados centrados en la proximidad de cada uno de los pozos, un mínimo en $q=0$, y dos puntos de ensilladura intermedios. Para $\gamma > \gamma_0$ sólo permanece el mínimo en el origen. El

campo medio de la aproximación de HBT como función de q es pues más complejo que el potencial original para $\gamma < \gamma_0$, y más simple para $\gamma > \gamma_0$, exhibiendo en ambos casos un mínimo en el origen. La situación es pues semejante al modelo de Landau Ghinzburg para transiciones de primer orden ²².

Al comparar la solución desplazada con la simétrica, la primera posee una energía libre más baja para $\gamma < \gamma'_0 = 1.084906 \gamma_0$. Existe por lo tanto un pequeño rango de valores de γ para los cuales ambas soluciones existen pero donde la simétrica es la más baja. En $\gamma = \gamma'_0$ tiene lugar una transición de fase de primer orden con cambios abruptos en t y q (o sea, no local) de acuerdo a la convención de Maxwell. Esta transición refleja el hecho de que en el estado fundamental exacto el pico de la densidad $\rho(Q) = \langle Q | \hat{\rho}_{ex} | Q \rangle$ cambia de 0 a un máximo degenerado en el intervalo $1.3\gamma_0 < \gamma < 0.75\gamma_0$. Sin embargo, la solución exacta no sufre ningún cambio abrupto. Dado que la densidad de HBT es simplemente una Gaussiana apropiadamente centrada, sólo puede ajustar la densidad exacta en uno de los mínimos.

Para valores fijos de $\gamma < \gamma_0$, se observa un comportamiento similar al variar la temperatura. La solución desplazada existe para $T < T_c(\gamma)$ (o bien, $\gamma < \gamma_c(T) < \gamma_0$) y es la que posee la energía libre más baja para $T < T'_c(\gamma) < T_c(\gamma)$ (o $\gamma < \gamma'_c(T) < \gamma_c(T)$). El sistema sufre una transición no local de primer orden desde la solución desplazada a la solución simétrica en $T = T'_c$ al aumentar la temperatura. Sin embargo, esta transición no corresponde a un cambio en el pico de la densidad exacta sino a un achatamiento de esta densidad. La densidad clásica es proporcional a $\exp\{-\beta V(Q)\}$, y el comportamiento clásico prevalece para temperaturas

suficientemente elevadas. Este incremento del achatamiento es ajustado por una vuelta a la solución simétrica en la temperatura crítica, dentro de HBT.

Resultados típicos son mostrados en la tabla III para el caso $\gamma = 1.5 \gamma_0$ (y $\lambda=1$). Se observa que la solución desplazada es muy buena en lo que respecta a la energía media. En la región 'metaestable' ($T_c' < T < T_c$) la solución desplazada provee mejores resultados para $\langle \hat{H} \rangle$ que la simétrica. No obstante, dado que esta última aproxima mucho mejor a la entropía exacta, su energía libre es menor. El carácter asimétrico de la solución desplazada involucra un mayor grado de orden (menor dispersión) lo que explica la baja entropía. Una mejor (más alta) entropía puede ser obtenida al restaurar la simetría con un operador densidad de la forma $\hat{\rho}_s = \frac{1}{2} [\hat{\rho}_d(q) + \hat{\rho}_d(-q)]$, debido a la propiedad de concavidad de la entropía (véase (I.3.16)), el cual provee los mismos valores medios de observables pares que $\hat{\rho}_d(\pm q)$ ($\hat{\rho}_d$ denota la densidad desplazada de HBT).

El valor medio de la coordenada q correspondiente a la solución desplazada permanece casi constante frente a variaciones de la temperatura, siendo menor en módulo que la posición del mínimo del potencial. La aproximación de HBT no predice el comportamiento apropiado del calor específico a bajas temperaturas (que está asociado a la cuasi degeneración entre los dos primeros estados exactos), pero la situación mejora a temperaturas medias y altas.

IV.8 EFECTOS DE UN TERMINO CUBICO

Si se añade un término cúbico (pequeño) al potencial biestable precedente, los dos mínimos cesan de exhibir igual profundidad, desapareciendo la degeneración de las soluciones desplazadas, al mismo tiempo que el mínimo que existía en el origen sufre un pequeño desplazamiento. No obstante, si el parámetro δ se incrementa, nuevos fenómenos críticos ocurren.

Concentraremos la atención sobre el caso $\gamma = 1.5 \gamma_0$. Para δ suficientemente pequeño, el cuadro general es similar a la sección anterior. Correcciones de primer orden en δ en la coordenada q son,

$$q_0 = -3\delta t_0 / (12\lambda t_0 + \gamma) , \quad (IV.8.1)$$

$$\Delta q_d = -3\delta(t_d + \gamma/16\lambda) / (\gamma + 12\lambda t_d) ,$$

donde el subíndice 0 (d) se refiere a la solución simétrica (desplazada).

De los cinco puntos estacionarios anteriores, los tres mínimos se desplazan en la dirección del mínimo más profundo del potencial, mientras que los puntos de ensilladura se desplazan en dirección opuesta. No obstante, a $T=0$, cuando $\delta = \pm 0.375$ uno de los mínimos desaparece junto con el punto de ensilladura más próximo, quedando solamente dos mínimos (localizados en las proximidades de los mínimos de $V(Q)$) y un punto de ensilladura. En $\delta = \pm 0.9095$ desaparecen las dos soluciones menos profundas, permaneciendo un único mínimo localizado en la región del pozo más profundo del potencial (para este valor de δ , el cociente entre

las profundidades de los pozos es de 0.266).

El comportamiento del sistema para valores fijos de δ y γ al aumentar la temperatura, es ilustrado en la tabla IV y Fig. 2, para el caso $\delta = -0.1$. Una característica notable es el hecho de que soluciones inexistentes a $T=0$, pueden reaparecer a temperatura finita. Por ejemplo, una solución 'cuasi simétrica' (c.s.), no presente a $T=0$, aparece en $T = T_{c1} \simeq 0.675$ (junto con un punto de ensilladura), y se transforma en la solución de energía libre más baja para $T > T_{c2} \simeq 1.704$. Todas las soluciones restantes desaparecen para T suficientemente alto. Esta solución c.s. exhibe un grado de orden más bajo que las soluciones desplazadas, o sea, una fluctuación mayor y una entropía más elevada, lo cual explica la menor energía libre, aunque su predicción de la energía media sea pobre.

Si tratamos de interpretar el significado de estas transiciones, puede resultar útil observar la evolución exacta de $\langle \hat{Q} \rangle$, el cual partiendo a $T=0$ de un valor cercano al de HBT, decrece rápidamente a bajas temperaturas. La fluctuación exacta $\langle \hat{Q}^2 \rangle - \langle \hat{Q} \rangle^2$ también registra un rápido aumento en la misma región de temperaturas, acercándose al valor de HBT dado por la solución c.s., mientras que el de la solución desplazada es prácticamente constante.

El comportamiento anterior de las soluciones de HBT, ocurre en la región $0.0375 \leq |\delta| \leq 1.02$. Para valores más altos de δ , la solución c.s. no reaparece a temperatura finita, y la evolución del sistema se torna suave en la descripción de HBT.

La solución metaestable correspondiente al mínimo menos profundo del potencial, puede ser considerada a $T=0$ como una

aproximación al primer estado excitado de \hat{H} . A temperatura finita, HBT describe aproximadamente la evolución de esta configuración metaestable, que desaparece para $T > T_{cs}$.

La predicción de HBT del calor específico es en general pobre a bajas temperaturas, pero los resultados mejoran al aumentar T .

Desde el punto de vista de los cap. I-II, resulta interesante considerar el problema inverso, en el cual se parte de un valor medio dado de la energía. La aproximación de HBT proporciona en este caso una cota inferior a la entropía exacta. De todas las soluciones de HBT, la correcta es en principio la de mayor entropía. No obstante, información adicional (por ej., el valor medio de la coordenada) puede inducir a la elección de otra solución, que brinde una descripción más apropiada. En este sentido, si además del conocimiento de $\langle \hat{H} \rangle$, se dispone de $\langle \hat{Q} \rangle$, el valor medio de la coordenada deja obviamente de ser un parámetro variacional, y la minimización se restringe a la elección de la fluctuación óptima. Las constantes de acoplamiento del potencial (δ , γ , λ) pueden interpretarse en el contexto estadístico general del cap. I, como parámetros de Lagrange asociados a $\langle \hat{Q}^2/2 \rangle$, $\langle \hat{Q}^3 \rangle$ y $\langle \hat{Q}^4 \rangle$ respectivamente, aunque en la aproximación de campo medio sólo se dispone de dos grados de libertad (el valor medio q y la fluctuación).

Cabe destacar que la temperatura efectiva de HBT (T_{ef}), es decir, aquella para la cual HBT provee la misma energía media que la solución exacta, puede ser menor o mayor que la temperatura exacta, y depende además de la solución de HBT elegida. Obviamente, la temperatura efectiva puede definirse sólo en el caso en que exista una solución de HBT con ese valor de la energía

media, o sea, para $\langle \hat{H} \rangle_{\bullet x}$ mayor que el valor mínimo de HB a $T=0$. A temperaturas suficientemente bajas, $T_{\bullet f} < T_{\bullet x}$, pues la energía aproximada es mayor que la energía exacta a $T = 0$.

IV.9 CALCULO DE LA SOLUCION EXACTA

El cálculo de los niveles de energía exactos se basa en los procedimientos de las ref. 16-17. El método consiste en la diagonalización del hamiltoniano en una base (truncada) de Hartree-Bogoliubov (IV.3.2), que sea solución de las ecuaciones de HB para $T=0$. De este modo, la dimensión de la base necesaria para obtener la precisión deseada es mucho menor de la que resultaría de utilizar la base original no perturbada. Utilizando el teorema de Wick (para $T=0$), el hamiltoniano puede reescribirse en la forma

$$\hat{H} = H_0 + \hat{h} + :V(\hat{Q}):, \quad (IV.9.1)$$

donde $H_0 = \langle 0 | \hat{H} - \hat{h} | 0 \rangle$, siendo $|0\rangle$ el vacío de los operadores bosónicos b' correspondientes a la solución de HB a $T=0$, \hat{h} el hamiltoniano efectivo de campo medio (IV.1.25) y (IV.5.6), y $:V(\hat{Q}):$ la interacción residual. Las ecuaciones de HB (IV.1.24) y (IV.5.5) a $T=0$, implican la anulación de los términos no diagonales de \hat{h} (incluyendo los términos lineales en b , b^+), lo cual, sumado al hecho que $:V(\hat{Q}):$ no conecta el vacío con estados de uno y dos bosones, explica el aumento en la rapidez de la convergencia. Son estas propiedades las que hacen ventajosa la utilización de la base de HB para la diagonalización del hamiltoniano en espacios finitos.

De este modo, en el ejemplo de la tabla I, una diagonalización utilizando los primeros 19 estados proporciona los tres primeros niveles con precisión de 7 dígitos, y ya con 30 estados, se logra la misma precisión para los primeros 6 niveles.

Existen varios métodos alternativos para calcular los niveles de energía de osciladores anarmónicos, aunque como ya hemos mencionado, los métodos perturbativos pueden diverger para valores no muy grandes de las constantes de acoplamiento. El método presente en cambio no exhibe divergencias.

La aplicación del método no ofrece dificultad alguna para los hamiltonianos de la sección IV.1, donde sólo existe un mínimo de HB a $T=0$. No obstante, para los casos de las secciones IV.5-8, donde varias soluciones de HB pueden existir simultáneamente a $T=0$, surge la cuestión sobre cual es la que brinda la convergencia más rápida, lo que no ha sido discutido en las ref. 16-17.

La solución de HB más baja es la mejor en lo que respecta al estado fundamental, aunque esto no es necesariamente cierto para los niveles excitados. En el caso cúbico de la tabla IV, una diagonalización de 20×20 utilizando la base correspondiente a la solución más baja, da una muy buena estimación para el estado fundamental, pero al mismo tiempo una pobre estimación de la energía del primer estado excitado. La utilización de la base centrada en el mínimo menos profundo brinda el resultado contrario y además, los valores proporcionados de los restantes cinco primeros niveles son algo mejores que en el primer caso. Cuando la dimensión de la base aumenta, las diferencias tienden a desaparecer. Con una diagonalización de 40×40 por ej., ambas bases proporcionan resultados exactos para los primeros nueve niveles hasta ocho dígitos significativos. Los resultados son ilustrados en la tabla V.

En el caso biestable, la base desplazada (y degenerada) debe ser comparada con la solución simétrica centrada en el origen.

Para pequeñas dimensiones, en el ejemplo de la tabla III, la solución simétrica brinda mejores resultados para los niveles más bajos de energía. No obstante, para matrices de mayores dimensiones, los resultados provistos por la solución desplazada son levemente mejores. La solución de HB más profunda puede encontrarse demasiado desplazada como para proporcionar buenos resultados, si la dimensión de la base utilizada es pequeña, ya que las autofunciones exactas son obviamente pares o impares respecto del origen.

APENDICE A

EL OPERADOR ESTADISTICO BOSONICO GENERAL MONODIMENSIONAL

Examinaremos en detalle el caso en que existe un sólo estado bosónico (de una partícula) accesible. El operador densidad más general de c.i., es de la forma

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \exp\{\lambda_0 + \lambda b^+ b + \frac{1}{2}(\gamma b^2 + \gamma^* b^{+2}) + \eta b^+ + \eta^* b\} \\ &= \exp\{\lambda'_0 + \lambda a^+ a + \frac{1}{2}(\gamma a^2 + \gamma^* a^{+2})\},\end{aligned}\quad (\text{IV.A.1})$$

donde (véase (II.3.30-32))

$$a = b + d, \quad a^+ = b^+ + d^*, \quad (\text{IV.A.2})$$

con

$$d = (\lambda\eta - \gamma^*\eta^*)/\lambda'^2, \quad (\text{IV.A.3})$$

$$|\lambda'| = (\lambda^2 - |\gamma|^2)^{1/2} = \det(M). \quad (\text{IV.A.4})$$

y $\lambda'_0 = \lambda_0 - \lambda|d|^2 - \frac{1}{2}(\gamma d^{*2} + \gamma^* d^2)$. La matriz M (II.3.27) es en este caso de 2x2,

$$M = \begin{bmatrix} \lambda & \gamma^* \\ \gamma & \lambda \end{bmatrix}, \quad (\text{IV.A.5})$$

y los autovalores de ΠM son precisamente $\pm\lambda'$. El caso convergente corresponde a λ' real y menor que cero, lo que implica

$$|\gamma| < |\lambda|, \quad \lambda < 0. \quad (\text{IV.A.6})$$

En este caso, mediante una transformación general de Bogoliubov

$$\begin{pmatrix} b' \\ b'^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X & Y \\ Y^* & X^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.A.7})$$

$$|X|^2 - |Y|^2 = 1, \quad (\text{IV.A.8})$$

podemos llevar $\hat{\rho}$ a la forma diagonal,

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda'_0 + \lambda' b'^+ b'\}, \quad (\text{IV.A.9})$$

donde $\text{sg}(\lambda') = \text{sg}(\lambda)$, si

$$|X|^2 + |Y|^2 = |\lambda/\lambda'|, \quad (\text{IV.A.10})$$

$$2\lambda' Y^* X = \gamma,$$

o sea, $|X|^2 = \frac{1}{2}(|\lambda/\lambda'| + 1)$, $|Y|^2 = \frac{1}{2}(|\lambda/\lambda'| - 1)$. Sólo una de las fases de X e Y queda determinada.

Utilizando (II.3.46) y definiendo el número medio de ocupación $f = \langle b'^+ b' \rangle = [\exp(-\lambda') - 1]^{-1}$ se obtiene,

$$D^c \Pi = \begin{pmatrix} \langle a^+ a \rangle & -\langle a^2 \rangle \\ \langle a^{+2} \rangle & -\langle a a^+ \rangle \end{pmatrix} = \left\{ \exp \left[- \begin{pmatrix} \lambda & \gamma^* \\ -\gamma & -\lambda \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\}^{-1}, \quad (\text{IV.A.11})$$

o sea,

$$\langle a^+ a \rangle = (\lambda/\lambda') (f + \frac{1}{2}) - \frac{1}{2}, \quad (\text{IV.A.12})$$

$$\langle a^2 \rangle = -(\gamma^*/\lambda') (f + \frac{1}{2}) = \langle a^{+2} \rangle^*.$$

Finalmente, en términos de los operadores originales se obtiene,

$$\begin{aligned} \langle b^+ b \rangle &= \langle a^+ a \rangle + |d|^2 = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda}, \\ \langle b^2 \rangle &= \langle a^2 \rangle + d^2 = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \gamma}, \end{aligned} \quad (\text{IV.A.13})$$

$$\langle b \rangle = -d = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \eta} = \langle b^+ \rangle^* , \quad (\text{IV.A.14})$$

$$\lambda_0 = -\ln(1+f) + (\lambda - \lambda')/2 + [\lambda |d|^2 + (\gamma d^{*2} + \gamma^* d^2)/2] . \quad (\text{IV.A.15})$$

Las fórmulas (IV.A.12-14) vinculan los valores medios con los correspondientes multiplicadores de Lagrange. La inferencia estadística resulta trivial, asignando el valor 0 a $\langle a^2 \rangle$, $\langle b \rangle$, si $\gamma = 0$, $\eta = 0$, respectivamente. Para obtener los multiplicadores a partir de los valores medios, pueden emplearse nuevamente las fórmulas anteriores, pero expresando f y $\lambda' = \ln[f/(f+1)]$ en términos de los valores medios,

$$\begin{aligned} (f + \frac{1}{2})^2 &= (\langle a^+ a \rangle + \frac{1}{2})^2 - |\langle a^2 \rangle|^2 \\ &= \{(\langle b^+ b \rangle - |d|^2 + \frac{1}{2})^2 - (|\langle b^2 \rangle - |d|^2|^2) \} . \end{aligned} \quad (\text{IV.A.16})$$

Por consiguiente, dado que $f > 0$, sólo es posible construir el operador estadístico si

$$(\langle a^+ a \rangle + \frac{1}{2})^2 - |\langle a^2 \rangle|^2 \geq \frac{1}{4} . \quad (\text{IV.A.17})$$

La desigualdad (IV.A.17) constituye la expresión del principio de incerteza en términos de los operadores de creación y aniquilación. La información físicamente coherente corresponde pues a operadores densidad convergentes. (IV.A.17) constituye también la condición para que la matriz $D^c \Pi$ (IV.A.11) sea diagonalizable. Las expresiones (IV.A.16-17) son invariantes frente a transformaciones de Bogoliubov.

La entropía (II.3.54) puede expresarse también en la forma

$$S = -\lambda'_0 + [\lambda' / (f + \frac{1}{2})] [(\langle a^+ a \rangle + \frac{1}{2})^2 - |\langle a^2 \rangle|^2] , \quad (\text{IV.A.18})$$

y no depende de η , es decir, de $\langle b \rangle$

Con el objeto de poseer una visión más clara de las fórmulas anteriores, es conveniente utilizar la representación de coordenadas e impulsos. El operador (IV.A.1) puede escribirse como

$$\hat{\rho} = \exp\{ \lambda_1 + \alpha \hat{Q}^2 + \beta \hat{P}^2 + \delta \hat{L} + \zeta \hat{Q} + \xi \hat{P} \} , \quad (\text{IV.A.19})$$

donde hemos introducido

$$\hat{L} = \hat{Q}\hat{P} + \hat{P}\hat{Q} = -i(b^2 - b^{+2}) , \quad (\text{IV.A.20})$$

y,

$$\begin{aligned} \zeta + i\xi &= (2)^{1/2} \eta , \\ \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} &= [\lambda \pm \text{Re}(\gamma)]/2 , \\ \delta &= -\text{Im}(\gamma)/2 , \\ \lambda_1 &= \lambda_0 - (\alpha + \beta)/2 . \end{aligned} \quad (\text{IV.1.21})$$

(IV.A.19) es el operador densidad más general que puede construirse a partir de formas cuadráticas hermiticas en el exponente. Al igual que en (IV.A.1) los términos lineales pueden eliminarse por medio de una traslación apropiada,

$$\hat{\rho} = \exp\{ \lambda'_1 + \alpha \hat{Q}_c^2 + \beta \hat{P}_c^2 + \delta \hat{L}_c \} , \quad (\text{IV.A.22})$$

donde los operadores 'centrados' $\hat{Q}_c = \hat{Q} - q$, $\hat{P}_c = \hat{P} - p$, $\hat{L}_c = \hat{L} - 2pq$ corresponden a los operadores a , a^+ , con

$$\begin{aligned} q &= -\frac{1}{2}(\beta\zeta - \delta\xi)/\lambda'^2 = -\text{Re}(d)/2^{1/2} , \\ p &= -\frac{1}{2}(\alpha\xi - \delta\zeta)/\lambda'^2 = -\text{Im}(d)/2^{1/2} , \end{aligned} \quad (\text{IV.A.23})$$

y poseen valor medio nulo, y $\lambda'_1 = \lambda_0 + \alpha q^2 + \beta p^2 + 2\gamma qp$. Utilizando (IV.A.11-13), se obtiene la relación entre los nuevos multiplicadores y los correspondientes valores medios, $\langle \hat{Q} \rangle = q$, $\langle \hat{P} \rangle = p$,

$$\begin{aligned}\langle \hat{Q}^2 \rangle - \langle \hat{Q} \rangle^2 &= -2\beta(f + \frac{1}{2}) / |\lambda'| \\ &= \langle \hat{Q}_c^2 \rangle, \\ \langle \hat{P}^2 \rangle - \langle \hat{P} \rangle^2 &= -2\alpha(f + \frac{1}{2}) / |\lambda'| \quad (\text{IV.A.24}) \\ &= \langle \hat{P}_c^2 \rangle, \\ \langle \hat{L}_c \rangle &= -4\delta(f + \frac{1}{2}) / |\lambda'|.\end{aligned}$$

Los autovalores λ' y f pueden expresarse en términos de las nuevas variables,

$$\lambda' = 2(\alpha\beta - \delta^2)^{1/2}, \quad (\text{IV.A.25})$$

$$(f + \frac{1}{2}) = [\langle \hat{Q}_c^2 \rangle \langle \hat{P}_c^2 \rangle - \frac{1}{4} \langle \hat{L}_c \rangle^2]^{1/2}. \quad (\text{IV.A.26})$$

El caso convergente corresponde pues a $\alpha < 0$, $\beta < 0$, y

$$\delta^2 < \alpha\beta, \quad (\text{IV.A.27})$$

o sea,

$$(f + \frac{1}{2})^2 = [\langle \hat{Q}_c^2 \rangle \langle \hat{P}_c^2 \rangle - \frac{1}{4} \langle \hat{L}_c \rangle^2] \geq \frac{1}{4}. \quad (\text{IV.A.28})$$

Por lo tanto, si los valores medios disponibles satisfacen el principio de incerteza, es posible diagonalizar la matriz densidad de un cuerpo por medio de una transformación (IV.A.7) y construir el correspondiente operador estadístico convergente. Las desigualdades (IV.A.6,27) expresan el principio de incerteza en términos de los multiplicadores de Lagrange. El caso puro

corresponde a $f = 0$ e incerteza mínima, $[\langle \hat{Q}_c^2 \rangle \langle \hat{P}_c^2 \rangle - \frac{1}{4} \langle \hat{L}_c \rangle^2] = \frac{1}{4}$.

La transformación (IV.A.7) corresponde en la representación de coordenadas a una transformación canónica general,

$$\begin{aligned}\hat{Q}' &= \hat{Q}_c [\operatorname{Re}(X+Y)] + \hat{P}_c [\operatorname{Im}(Y-X)] , \\ \hat{P}' &= \hat{Q}_c [\operatorname{Im}(X+Y)] + \hat{P}_c [\operatorname{Re}(X-Y)] ,\end{aligned}\tag{IV.A.29}$$

Eligiendo las fases de modo que $\operatorname{Im}(X-Y) = 0$, La transformación (IV.A.29) puede reducirse a

$$\begin{aligned}\hat{Q}' &= [2(\alpha - \delta^2/\beta) / |\lambda'|]^{1/2} \hat{Q}_c , \\ \hat{P}' &= [2\beta / |\lambda'|]^{1/2} (\hat{P}_c + \delta \hat{Q}_c / \beta) ,\end{aligned}\tag{IV.A.30}$$

de modo que $\alpha \hat{Q}_c^2 + \beta \hat{P}_c^2 + \delta \hat{L}_c = \frac{1}{2} \lambda' (\hat{Q}'^2 + \hat{P}'^2)$.

Referencias:

1. F. T. Hioe and E. W. Montroll, J. Math. Phys. 16, 1945 (1975).
2. K. Banerjee, S. P. Bhatnagar, V. Choudry and S. Kanwal, Proc. Royal Soc. London A360, 575 (1979).
3. J. P. Flessas and R. R. Whitehead, J. Math. Phys. 25, 923 (1984).
4. J. P. Chadaccioni and R. Caboz, J. Math. Phys. 25, 2436 (1984).
5. R. N. Chaudhury and B. Mukherjee, J. Phys. A17, 227 (1984), A16 3193 (1983).
6. B. K. Bhattacharya, S. Bhattacharya and R. Roychoudhoury, Fizica 16, 161 (1984).
7. S. Graffi and V. Grecchi, Phys. Rev. D8, 3487 (1973).
8. J. P. Flessas, R. R. Whitehead and A. Rigas, J. Phys. A16, 85 (1983).
9. M. Znojil and M. Tater, J. Phys. A19, 2317 (1986).
10. C. Bender and T. Wu, Phys. Rev. D7, 1670 (1973).
11. M. Schwartz Jr., J. Stat. Phys. 15, 255 (1976).
12. W. Witschel, Chem. Phys. Lett. 71, 131 (1980).
13. C. W. Bernard, Phys. Rev. D12, 3312 (1974).
14. J. Nuñez, A. Plastino and R. Rossignoli, Phys. Rev. D33, 1709 (1986).
15. J. Nuñez, A. Plastino and R. Rossignoli, J. Phys. A (en prensa).
16. C. S. Hsue and J. L. Chern, Phys. Rev. D29, 643 (1984).
17. C. S. Hsue, Phys. Rev. A33, 1392 (1986).
18. G. Bozzolo and A. Plastino, Phys. Rev. D24, 3113 (1981).
19. G. Bozzolo, C. Esebbag and A. Plastino, Phys. Rev. D26, 801

(1982).

20. S. Coleman, Phys. Rev. D11, 2088 (1975).

21. R. Peierls, Phys. Rev. 54, 918 (1938).

22. R. Gilmore, 'Catastrophe Theory for Scientists and Engineers',
(Wiley, N.Y., 1981).

Tabla I : Energía libre (F), energía media (E) y calor específico (Cv), para el caso $\lambda \hat{Q}^4$, con $\lambda = 1$. Las cotas 1 y 2 se refieren a (IV.3.3), utilizando la base de HB a $T=0$ (1), y la base óptima (2). La aproximación restante utiliza los autovalores de la ref. 1.

Tabla II : Las mismas cantidades de la Tabla I, para el potencial $\lambda \hat{Q}^6$, con $\lambda = 1$.

Tabla III : Cantidades de interés para el potencial biestable, como función de la temperatura T. (a) Resultados exactos; (b) solución desplazada; (c) solución simétrica; Los parámetros del potencial son $\lambda = 1.0$, $\gamma = 1.5 \gamma_0$. La solución (c) es más baja que (b) para $T > T'_c = 1.398$. Para $T = T_c = 2.008$, la solución desplazada deja de existir.

Tabla IV : Las mismas cantidades que en la tabla III, pero para el potencial (IV.6.1), con $\lambda = 1.0$, $\delta = -0.1$, y $\gamma = 1.5 \gamma_0$. (a) Resultados exactos. (b) solución desplazada; (c) solución 'cuasi simétrica'; (d) solución desplazada correspondiente al mínimo menos profundo. A $T=0$, (e) denota el primer estado excitado (exacto).

Tabla V : Los primeros niveles del hamiltoniano de la tabla IV, para distintas dimensiones de las correspondientes matrices de energía y diferentes bases de HB. (b) indica la base correspondiente a la solución de HB más profunda a $T=0$, y (d) la base centrada alrededor del mínimo menos profundo.

Figura 1: Energía libre en función de la temperatura, para el potencial de la Tabla I, de acuerdo a HBT (línea llena), resultados exactos (línea de trazos) y cotas 1 y 2 (líneas punteadas).

Figura 2: Energías libres correspondientes a las distintas soluciones de HBT (líneas llenas), y resultados exactos, para el potencial (IV.6.1). Los parámetros utilizados son los mismos que en la tabla IV, así también como el significado de (b), (c), (d). Se indican las temperaturas críticas.

Figura 3: Valor medio de la coordenada como función de la temperatura, de acuerdo a las soluciones (b) y (c), y resultados exactos, para el mismo caso de la Fig. 2. Las líneas de trazos verticales indican 'transiciones de fase', de acuerdo a los criterios de máxima entropía (1), mínima energía libre (2) y mínima energía (3).

TABLA I

T		F	E	Cv
0.5	HBT	0.80343845	0.84854623	0.28662594
	Cota 1	0.80338825	0.84881945	0.28913342
	Cota 2	0.80332245	0.84927288	0.29127481
	Ref. 1	0.79244559	0.84311195	0.31189355
	Exacta	0.79335295	0.84403666	0.31172643
1.0	HBT	0.67788976	1.0897591	0.60595757
	Cota 1	0.67774886	1.0868876	0.58445857
	Cota 2	0.67427448	1.0988148	0.59845737
	Ref. 1	0.65606008	1.0976758	0.62900901
	Exacta	0.65710488	1.0980034	0.62705064
2.5	HBT	-0.47086906	2.1366460	0.73584156
	Cota 1	-0.42961468	2.0390796	0.64293420
	Cota 2	-0.49920994	2.1878289	0.69532142
	Ref. 1	-0.54971611	2.1622275	0.74127561
	Exacta	-0.54626465	2.1606959	0.74104967
6.5	HBT	-6.2942336	5.1408776	0.75642309
	Cota 1	-5.7736375	4.5271774	0.60488674
	Cota 2	-6.3987348	5.2209465	0.70127688
	Ref. 1	-6.5471669	5.1758211	0.75770974
	Exacta	-6.5365213	5.1764607	0.75843893

TABLA II

T		F	E	Cv
0.5	HBT	0.83280399	0.86047737	0.20478461
	Cota 1	0.83275096	0.86085895	0.20989786
	Cota 2	0.83266767	0.86151128	0.21359429
	Exacta	0.79703880	0.83765964	0.26914624
1.0	HBT	0.74184963	1.0567151	0.51572382
	Cota 1	0.74041402	1.0567714	0.49327733
	Cota 2	0.73390558	1.0795902	0.51531124
	Exacta	0.67975329	1.0675203	0.57297008
2.5	HBT	-0.19024249	1.9682712	0.64501009
	Cota 1	-0.14089292	1.8269212	0.49928327
	Cota 2	-0.26415773	2.0693646	0.58248305
	Exacta	-0.39315689	2.0251444	0.66082598
6.5	HBT	-5.0940339	4.6089268	0.66590719
	Cota 1	-4.3354241	3.6566445	0.42885820
	Cota 2	-5.3794041	4.6030839	0.57317669
	Exacta	-5.7340146	4.6943943	0.66947754

TABLA III

	T	F	\hat{Q}_1	S	C_V	$\langle \hat{Q}^2 \rangle$	$\langle \hat{Q} \rangle$
(a)		-1.76138	-1.76138	0.	0.	1.44111	0.
(b)	0.	-1.63700	-1.63700	0.	0.	1.55968	1.18779
(c)		-0.95561	-0.95561	0.	0.	0.66607	0.
(a)		-1.97277	-1.69808	0.68675	0.08428	1.52528	0.
(b)	0.4	-1.63709	-1.63624	0.00212	0.03166	1.55952	1.18769
(c)		-1.00886	-0.85824	0.37655	0.81687	0.68659	0.
(a)		-2.27094	-1.61558	0.81920	0.33876	1.52254	0.
(b)	0.8	-1.64924	-1.58467	0.08072	0.48269	1.54855	1.18074
(c)		-1.23741	-0.65121	0.73276	0.80071	0.72579	0.
(a)		-2.63358	-1.44070	0.99406	0.51409	1.50803	0.
(b)	1.2	-1.71528	-1.40375	0.25960	0.77430	1.50805	1.15474
(c)		-1.57821	-0.42898	0.95769	0.76773	0.76301	0.
(a)		-2.84079	-1.33284	1.07711	0.56120	1.50185	0.
(b)	1.4	-1.77764	-1.26651	0.36510	0.82458	1.47487	1.13298
(c)		-1.77875	-0.31482	1.04567	0.75599	0.78067	0.
(a)		-3.30206	-1.09680	1.22514	0.61188	1.49441	0.
(b)	1.8	-1.96895	-0.89286	0.59783	0.86272	1.36836	1.06013
(c)		-2.22737	-0.08204	1.19185	0.73909	0.81429	0.
(a)		-3.55369	-0.97302	1.29034	0.62499	1.49319	0.
(b)	2.0	-2.10315	-0.57261	0.76527	0.91323	1.23696	0.96269
(c)		-2.47206	-0.03619	1.25413	0.73295	0.83032	0.
(a)		-4.09352	-0.71974	1.40574	0.63947	1.49508	0.
(b)	2.4	-	-	-	-	-	-
(c)		-2.99615	0.27571	1.36327	0.72372	0.86106	0.

TABLE IV

	T	F	$\langle \hat{H} \rangle$	S	C_V	$\langle \hat{Q}^2 \rangle - \langle \hat{Q} \rangle^2$	$\langle \hat{Q} \rangle$
(a)	0.	-1.92727	-1.92727	0.	0.	0.28299	1.15474
(b)		-1.86802	-1.86802	0.	0.	0.14526	1.23408
(c)		-	-	-	-	-	-
(d)		-1.42625	-1.42625	0.	0.	0.15262	-1.14185
(e)		-1.47047	-1.47047	0.	0.	0.37098	-1.05192
(a)	0.6	-2.16342	-1.75558	0.67974	0.31435	1.36550	0.44920
(b)		-1.86993	-1.85682	0.02191	0.20616	0.14636	1.23272
(c)		-	-	-	-	-	-
(d)		-1.42882	-1.41213	0.02782	0.24483	0.15422	-1.13976
(a)	0.9	-2.39047	-1.64084	0.83292	0.45010	1.44589	0.31758
(b)		-1.88818	-1.78913	0.11006	0.56645	0.15315	1.22438
(c)		-1.33202	-0.62553	0.78499	0.79951	0.71750	0.17249
(d)		-1.45072	-1.33437	0.12928	0.61009	0.16322	-1.12793
(a)	1.5	-2.97506	-1.31696	1.10540	0.60023	1.47491	0.20346
(b)		-2.03596	-1.44345	0.39501	0.83225	0.19071	1.17713
(c)		-1.89918	-0.27722	1.08131	0.75467	0.78272	0.11836
(d)		-1.61984	-0.94352	0.45088	0.84501	0.21532	-1.05681
(a)	1.8	-3.32389	-1.13234	1.21753	0.58623	1.47814	0.17429
(b)		-2.17837	-1.17756	0.55600	0.85534	0.22412	1.13350
(c)		-2.24018	-0.10003	1.18897	0.74183	0.80960	0.10565
(d)		-1.78578	-0.56234	0.67969	0.89404	0.28941	-0.94616
(a)	2.1	-3.70415	-0.94177	1.31542	0.64138	1.48154	0.15349
(b)		-2.37149	-0.81993	0.73884	0.88040	0.27992	1.05671
(c)		-2.61102	0.07922	1.28107	0.73246	0.83465	0.09650
(d)		-	-	-	-	-	-
(a)	2.4	-4.11196	-0.74819	1.40160	0.64839	1.48619	0.13798
(b)		-	-	-	-	-	-
(c)		-3.00768	-0.26036	1.36168	0.72546	0.85832	0.08954
(d)		-	-	-	-	-	-

TABLE V

	<u>10 x 10</u>		<u>20 x 20</u>	
	(b)	(d)	(b)	(d)
E_0	-1.9200907	-1.4921396	-1.9269317	-1.9212578
E_1	0.3088737	0.0771951	-1.4409766	-1.4700670
E_2	1.8780254	1.8434449	0.6694388	0.6550543
E_3	4.7476714	4.6221944	2.1519007	2.0824597
E_4	8.2154376	7.9918896	4.3881601	4.2637932

	<u>30 x 30</u>		<u>40 x 40</u>
	(b)	(d)	(b) , (d)
E_0	-1.9272677	-1.9272671	-1.9272677
E_1	-1.4704705	-1.4704708	-1.4704708
E_2	0.6399225	0.6399237	0.6399220
E_3	2.0421451	2.0421468	2.6421422
E_4	4.1501208	4.1501192	4.1501058

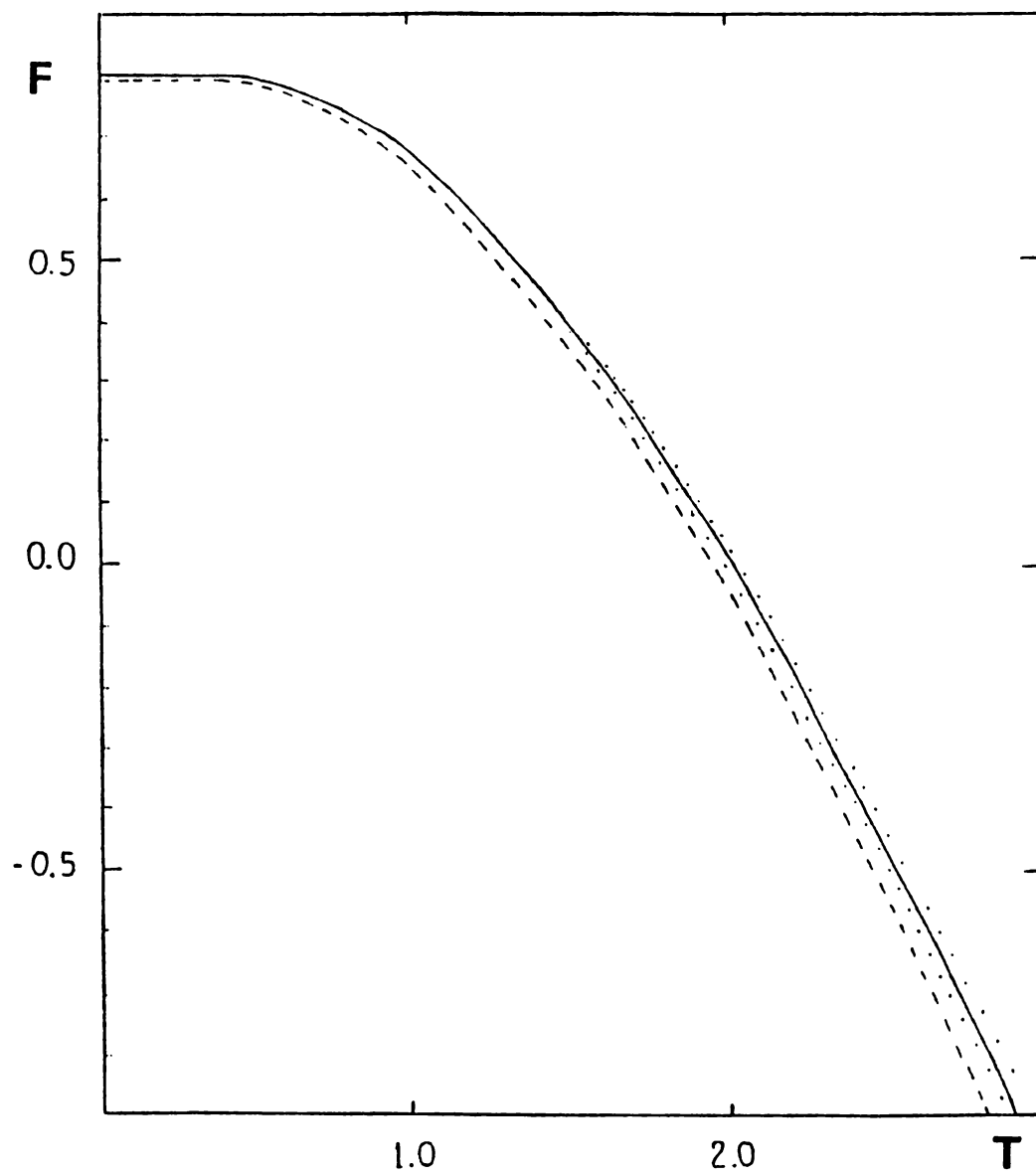


FIGURA 1

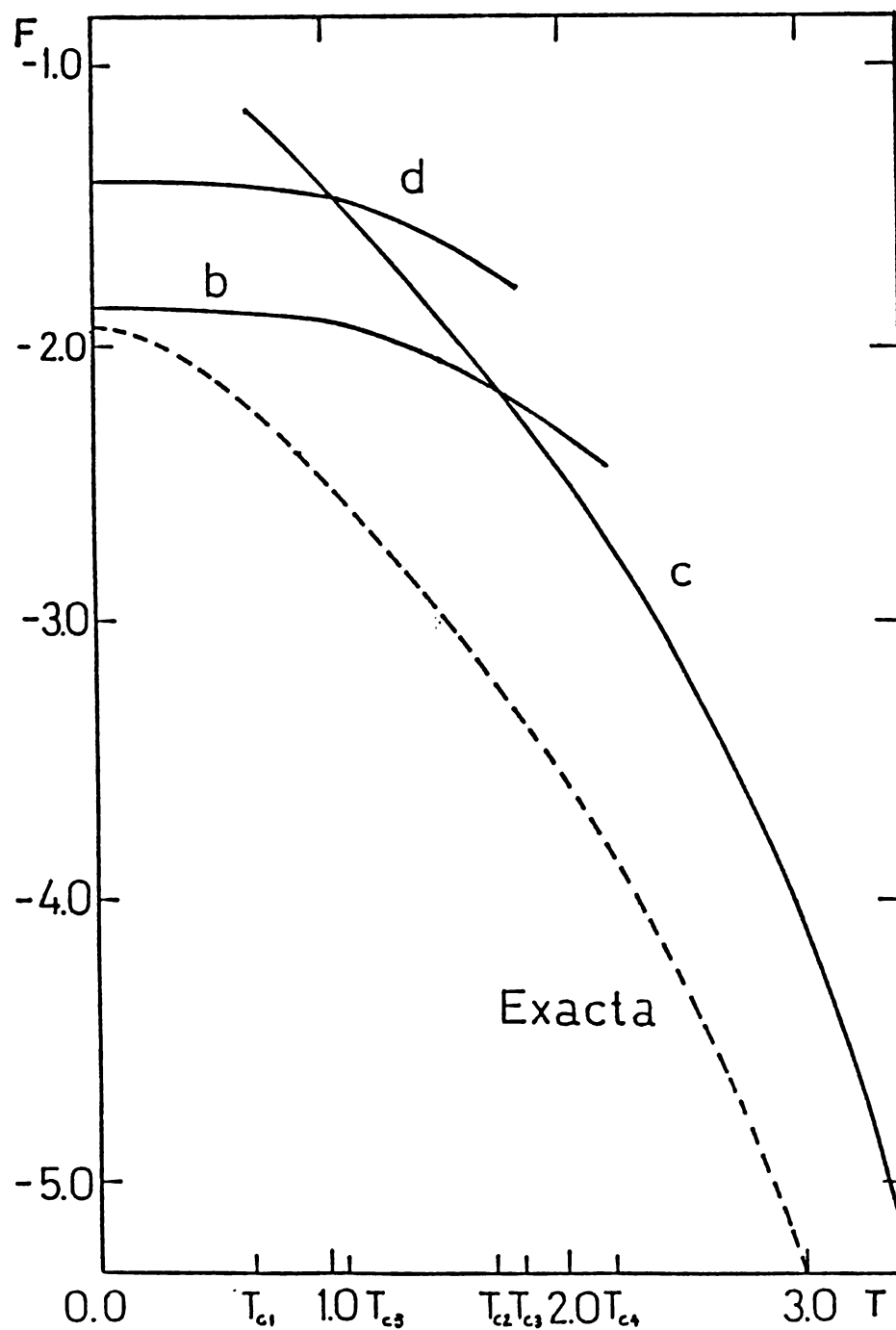


FIGURA 2

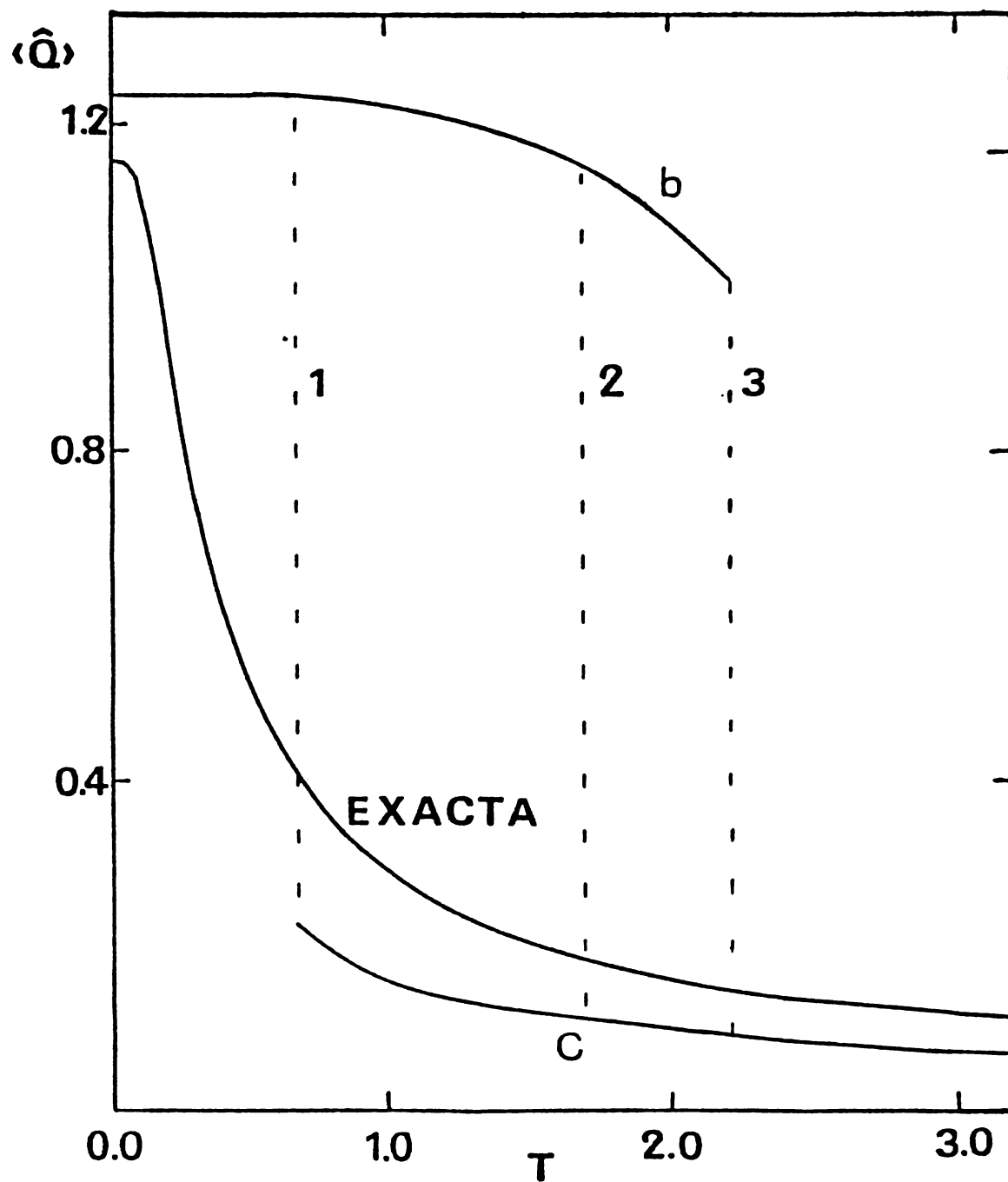


FIGURA 3

CAPITULO V

TRATAMIENTOS AUTOCONSISTENTES EN LA EVOLUCION TEMPORAL DEL OPERADOR ESTADISTICO

INTRODUCCION

Hasta ahora nos hemos ocupado de los aspectos estáticos de la generalización estadística de aproximaciones autoconsistentes. En este capítulo pasaremos a estudiar problemas dependientes del tiempo, concentrándonos en la evolución temporal de operadores estadísticos, en especial aquellos de c.i., y en las aproximaciones que conservan tal carácter, tales como Hartree-Fock dependiente del tiempo y otras generalizaciones introducidas en esta Tesis.

La aproximación de Hartree-Fock dependiente del tiempo (HFDT) ha sido ampliamente empleada durante los últimos años para describir varios fenómenos nucleares¹, y exhibe por cierto diversas ventajas. El método permite dar una visión unificada de varios tipos de fenómenos colectivos, partiendo de excitaciones vibracionales y rotacionales, hasta procesos tales como fisión, fusión, formación de núcleos compuestos, reacciones profundamente inelásticas, etc, los cuales están caracterizados por movimientos colectivos de gran amplitud¹. Siendo esencialmente una aproximación de partícula independiente, el método incluye además los grados de libertad de p.i., y la competencia de éstos con los modos colectivos.

Los estudios teóricos sobre la aproximación de HFDT se han centrado generalmente en la evolución temporal de un Determinante de Slater (D.S.) inicial²⁻⁶, lo que equivale a suponer que el estado inicial del sistema a ser estudiado puede ser descripto apropiadamente por una matriz densidad de un cuerpo idempotente, la cual evoluciona luego en el tiempo conservando su idempotencia.

Tal condición puede resultar muy restrictiva.

En este capítulo nos ocuparemos de la generalización estadística del formalismo anterior en espacios finitos⁷, abandonando la restricción de idempotencia. Ciertas características de tal extensión pueden apreciarse en forma inmediata, como ser la posibilidad de estudiar la evolución temporal de un sistema partiendo de condiciones iniciales mucho más generales que aquellas que la aproximación pura puede ajustar. El tratamiento estadístico de la aproximación de p.i. dependiente del tiempo, ha sido abordado recientemente en la literatura⁸⁻¹⁰, aunque con referencia a aspectos diferentes a los tratados en esta Tesis.

Nosotros centralizaremos la atención sobre un aspecto particular que el tratamiento estadístico generalizado es capaz de ofrecer: el de realizar predicciones basadas en la inferencia estadística. Es posible así estudiar la evolución temporal de sistemas de los cuales se posee un conocimiento inicial parcial, y no necesariamente compuesta de valores medios de operadores de un cuerpo. Además, el contexto estadístico permite desarrollar un método de truncamiento sistemático del número de ecuaciones resultantes⁷, considerando sólo los grados de libertad relevantes.

El formalismo es presentado en forma totalmente general en este capítulo, basado en parte en la ref. 7, e ilustrado en el capítulo VI en un modelo de simetría $U(n)$.

V.1 EVOLUCION TEMPORAL EXACTA DE OPERADORES ESTADISTICOS

La ecuación de Liouville-Von Neumann

$$\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}] , \quad (V.1.1)$$

gobierna la evolución temporal de un sistema descrito por el operador estadístico $\hat{\rho}$, siendo \hat{H} el hamiltoniano del sistema. Supondremos que la situación inicial está determinada por el conocimiento de m valores medios de observables \hat{O}_i , $i=1, \dots, m$, los cuales no dependen explícitamente del tiempo. El operador estadístico inicial será entonces de la forma (I.2.3),

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t=0) &= \exp\{\lambda_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i \hat{O}_i\} \\ &\equiv \hat{\rho}_0 . \end{aligned} \quad (V.1.2)$$

A partir de (V.1.1) se deduce inmediatamente el teorema de Ehrenfest (en lo sucesivo supondremos $\hbar = 1$),

$$\begin{aligned} -i \frac{\partial \langle \hat{O}_i \rangle}{\partial t} &= \text{Tr} \left[\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} \hat{O}_i \right] \\ &= \langle [\hat{H}, \hat{O}_i] \rangle , \end{aligned} \quad (V.1.3)$$

que describe la evolución temporal de los valores medios $\langle \hat{O}_i \rangle$, y en el cual nos basaremos para desarrollar métodos aproximados que describan la evolución temporal del sistema. La ecuación (V.1.3) puede ser resuelta inmediatamente si los m operadores \hat{O}_i pertenecen a un conjunto $\{\hat{O}_i, i=1, \dots, m, \dots, q\}$, que cierra una semiálgebra bajo conmutación con \hat{H} ¹¹⁻¹²,

$$[\hat{H}, \hat{O}_i] = i \sum_{j=0}^q q_{ji} \hat{O}_j, \quad (\text{V.1.4})$$

donde \hat{O}_0 representa el operador identidad, y q_{ji} las 'constantes de estructura' de la semiálgebra. Utilizando (V.1.4), (V.1.3) puede reescribirse en la forma

$$\frac{\partial O_i}{\partial t} = - \sum_{j=0}^q q_{ji} O_j, \quad (\text{V.1.5})$$

lo cual constituye un sistema cerrado de ecuaciones lineales. Junto con las condiciones iniciales $O_i(t=0) = O_i^0$, $i=1, \dots, m$, suplementadas con las adicionales $\lambda_i = 0$, $i=m+1, \dots, q$, el sistema (V.1.5) determina completamente los valores de expectación O_i para todo tiempo posterior. La dinámica del problema queda determinada solamente por las constantes q_{ji} al restringir la atención al conjunto $\{\hat{O}_i, i=1, \dots, q\}$. El operador estadístico para cualquier tiempo t está dado por¹¹⁻¹²

$$\hat{\rho}(t) = U(t) \hat{\rho}_0 U^\dagger(t) \quad (\text{V.1.6a})$$

$$= \exp\{\lambda_0(t) + \sum_{i=1}^q \lambda_i(t) \hat{O}_i\}, \quad (\text{V.1.6b})$$

donde $U(t)$ es el operador unitario de evolución ($U(t) = \exp\{-i\hat{H}t\}$ si \hat{H} no depende explícitamente del tiempo). A partir de (V.1.6a) se muestra fácilmente que $S = -\langle \ln(\hat{\rho}) \rangle$, o en general, el valor medio de cualquier función $F(\hat{\rho})$ desarrollable en serie de potencias (que no dependa explícitamente del tiempo), se conserva en la evolución exacta:

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\hat{\rho}(t) F(\hat{\rho}(t))] &= \text{Tr}[U \hat{\rho}_0 U^\dagger U F(\hat{\rho}_0) U^\dagger] \\ &= \text{Tr}[\hat{\rho}_0 F(\hat{\rho}_0)]. \end{aligned} \quad (\text{V.1.7})$$

Resulta obvio además que el valor medio de cualquier operador que conmuta con \hat{H} es constante en el tiempo. La situación usual de equilibrio corresponde al caso en que todos los operadores \hat{O}_i conmutan con \hat{H} y por lo tanto, $[\hat{H}, \hat{\rho}] = 0$. Situaciones particulares de equilibrio pueden ocurrir para parámetros λ_i iniciales tales que $[\hat{H}, \hat{\rho}_0] = 0$ (es decir, $[\hat{H}, \ln(\hat{\rho}_0)] = 0$), en cuyo caso $\langle [\hat{H}, \hat{O}_i] \rangle_{t=0} = 0$ (lo que no implica $[\hat{H}, \hat{O}_i] = 0$).

La conservación de la entropía puede utilizarse¹¹⁻¹² para derivar la ecuación de movimiento de los multiplicadores λ_i :

$$\begin{aligned} 0 &= dS/dt \\ &= - \sum_{i,j=0}^q O_i [d\lambda_i/dt - q_{ij}\lambda_j] . \end{aligned} \quad (V.1.8)$$

Por lo tanto,

$$d\lambda_i/dt = \sum_{j=1}^q q_{ij}\lambda_j . \quad (V.1.9)$$

La matriz de 'estructura' para los λ_i es pues el negativo de la traspuesta de la matriz correspondiente a los operadores. Notemos que en virtud de la definición (V.1.4), $q_{i0} = 0$. Además, $d\lambda_0/dt = 0$, pues al ser $U(t)$ unitaria, no cambia la traza de $\hat{\rho}(t)$.

No obstante, en la mayoría de los casos de interés físico, y aún en sistemas finitos, el valor de q es muy grande, y el esquema (V.1.5) es difícil de aplicar. Si el hamiltoniano \hat{H} contiene términos de m cuerpos, su conmutador con un operador de n cuerpos es en general un operador de $n+m-1$ cuerpos, por lo que en términos de operadores el álgebra puede cerrarse en principio sólo para $m=1$ (hamiltonianos de un cuerpo). Si $m>1$, la semiálgebra se cierra en espacios finitos recién en términos de valores medios (el valor

medio de un operador de m cuerpos es nulo si $m > N$, siendo N el número de partículas presentes). Por consiguiente, en estos casos el valor de q puede ser extremadamente grande. La diagonalización de \hat{H} y $\hat{\rho}$, y la utilización del operador $U(t)$ para describir la evolución temporal plantea en general problemas semejantes, pues en un tratamiento estadístico son requeridos todos los autoestados de \hat{H} , lo cual exige un extraordinario trabajo numérico si el número de estados accesibles es elevado, resultando además difícil extraer la información deseada.

Es necesario entonces desarrollar métodos aproximados que conduzcan a ecuaciones cuya solución numérica sea posible, y además, que concentren la atención sobre los operadores relevantes del sistema, es decir, aquellos sobre los que se desea poseer información. Estos métodos pueden basarse en desarrollos perturbativos⁹, por ej., alrededor de una evolución temporal simple generada por un hamiltoniano no perturbado¹⁹, o bien, en soluciones autoconsistentes⁷, sobre las cuales nos ocuparemos en el resto de este capítulo.

V.2 LA APROXIMACION GENERAL AUTOCONSISTENTE

Es posible obtener siempre una solución aproximada de la ecuación (V.1.1) si se restringe $\hat{\rho}(t)$, para todo tiempo t , a un operador de la forma?

$$\hat{\rho}(t) = \exp\{\lambda_0(t) + \sum_{i=1}^k \lambda_i(t) \hat{O}_i\}, \quad m \leq k < q, \quad (V.2.1)$$

es decir, imponiendo $\lambda_i(t) = 0$ si $i > k$. De este modo, la semiálgebra con \hat{H} en (V.1.3) es cerrada en forma no lineal,

$$-i \frac{\partial \hat{O}_i}{\partial t} = \text{Tr}[\hat{\rho}(t) [\hat{H}, \hat{O}_i]] \quad , \quad i=1, \dots, k, \quad (V.2.2)$$

donde los valores de expectación de aquellos operadores \hat{O}_j , $j > k$, que aparecen en $[\hat{H}, \hat{O}_i]$ y no pertenecen al conjunto de operadores relevantes $\{\hat{O}_i, i=1, \dots, k\}$ son obtenidos por inferencia estadística, y son funciones de los O_i :

$$\begin{aligned} \langle \hat{O}_j \rangle &= \text{Tr}[\hat{\rho}(t) \hat{O}_j] \\ &= F(O_1, \dots, O_k) \quad , \quad j > k. \end{aligned} \quad (V.2.3)$$

De este modo, el esquema autoconsistente proporciona la derivada temporal inicial correcta de todos los valores medios. En general, los operadores relevantes son aquellos cuyos valores medios son conocidos a $t = 0$, en cuyo caso $k = m$, y el operador estadístico es restringido a la misma forma funcional inicial. No obstante, pueden incorporarse otros grados de libertad al incluir algunos de los operadores que aparecen en el cierre (V.1.4). Es importante remarcar que la entropía $S = -\langle \ln\{\hat{\rho}(t)\} \rangle$ sigue siendo

una constante de movimiento dentro de esta aproximación:

$$\begin{aligned}
 dS/dt &= - \sum_{i=1}^k \lambda_i(t) dO_i/dt \\
 &= - \mathcal{L} \sum_{i=1}^k \lambda_i(t) \langle [\hat{H}, \hat{O}_i] \rangle \\
 &= - \mathcal{L} \langle [\hat{H}, \ln(\hat{\rho})] \rangle \\
 &= 0,
 \end{aligned}
 \tag{V.2.4}$$

donde se ha utilizado la relación (I.3.7). La información queda por lo tanto restringida al subespacio de observables relevantes, evitando que fluya hacia los operadores considerados irrelevantes.

La correspondiente ecuación de movimiento para los λ_i es en general más compleja, y puede obtenerse haciendo uso de (I.3.11),

$$\begin{aligned}
 dO_i/dt &= - \sum_{j=0}^k d\lambda_j/dt \langle \hat{O}_j^* \hat{O}_i \rangle \\
 &= \mathcal{L} \langle [\hat{H}, \hat{O}_i] \rangle,
 \end{aligned}
 \tag{V.2.5}$$

donde \hat{O}_i^* es la transformada de Kubo de \hat{O}_i introducida en la sección (I.3). Por lo tanto,

$$d\lambda_i/dt = \mathcal{L} \sum_{j=1}^k K_{ij}^{-1} \langle [\hat{H}, \hat{O}_j] \rangle,
 \tag{V.2.6}$$

donde hemos definido la matriz

$$K_{ij} = \langle \hat{O}_j^* \hat{O}_i \rangle = \langle \hat{O}_i^* \hat{O}_j \rangle.
 \tag{V.2.7}$$

K_{ij} puede interpretarse^o como el producto escalar de los observables \hat{O}_i y \hat{O}_j . Si el conjunto $\{\hat{O}_i, i=1, \dots, k\}$ es abeliano,

entonces $K_{ij} = \langle \hat{O}_i \hat{O}_j \rangle$.

Puede demostrarse que la solución autoconsistente hace estacionaria una cierta acción, en analogía al caso puro, donde las ecuaciones autoconsistentes pueden derivarse de¹

$$\delta \int \langle \psi | i \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} | \psi \rangle dt = 0, \quad (V.2.8)$$

donde las funciones $|\psi\rangle$ son restringidas a un conjunto particular (por ej. D.S. en el caso de HFDT). Si las funciones de onda $|\psi\rangle$ son arbitrarias, entonces (V.2.8) conduce obviamente a la ecuación de Schrödinger.

En el presente contexto estadístico, (V.2.8) debe reemplazarse por la expresión más general^{9,14}

$$\delta \left\{ \int_0^{t_1} \text{Tr}[\hat{\rho}(t) (\frac{\partial \hat{O}(t)}{\partial t} + i[\hat{H}, \hat{O}(t)])] dt + \text{Tr}[\hat{O}(t_0) \hat{\rho}(t_0)] \right\} = 0 \quad (V.2.9a)$$

lo que equivale (mediante una integración por partes) a

$$\delta \left\{ - \int_0^{t_1} \text{Tr}[\hat{O}(t) (\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} + i[\hat{H}, \hat{\rho}(t)])] dt + \text{Tr}[\hat{O}(t_1) \hat{\rho}(t_1)] \right\} = 0 \quad (V.2.9b)$$

donde $\hat{\rho}(t)$ es un operador densidad y $\hat{O}(t)$ un observable. Las variaciones de $\hat{\rho}(t)$ quedan condicionadas por $\hat{\rho}(t=0) = \hat{\rho}_0$ siendo $\hat{\rho}_0$ el operador estadístico inicial del sistema, y las de $\hat{O}(t)$ por la condición $\hat{O}(t_1) = \hat{O}_1$, donde \hat{O}_1 es el observable cuyo valor medio se desea averiguar para $t = t_1$. De esta manera, (V.2.9) conduce a la ecuación de Liouville para $\hat{\rho}(t)$, y a la ecuación de Heisenberg (con el signo del tiempo invertido) para $\hat{O}(t)$. Pero si se restringe $\hat{\rho}(t)$ a la forma particular (V.2.1) y $\hat{O}(t)$ a la forma

$\sum_{i=1}^k a_i(t) \hat{O}_i(t)$, la variación conduce a las ecuaciones autoconsistentes, tanto para $O_i(t)$ como $\lambda_i(t)$, como puede apreciarse de (V.2.9a) y (V.2.9b) respectivamente.

Cabe remarcar finalmente que si se proyecta la evolución exacta sobre el subespacio formado por los observables relevantes, puede construirse un operador estadístico efectivo

$$\hat{\rho}_{\bullet f}(t) = \exp\{\lambda'_0(t) + \sum_{i=1}^k \lambda'_i(t) \hat{O}_i\} , \quad (V.2.10)$$

con multiplicadores λ'_i tales que reproduzcan los valores medios exactos $O_i^{\bullet x}(t)$, $i=1, \dots, k$. La correspondiente entropía efectiva

$$\begin{aligned} S_{\bullet f}(t) &= -(\lambda'_0(t) + \sum_{i=1}^k \lambda'_i(t) O_i^{\bullet x}(t)) \\ &\geq S(t=0) , \end{aligned} \quad (V.2.11)$$

no es constante en el tiempo. Dado que $\hat{\rho}_{\bullet f}(t)$ se construye descartando la información correspondiente a $O_j^{\bullet x}(t)$, $j > k$, su entropía es mayor o igual que la inicial, que es la del operador densidad exacto. Es en este punto donde nace la irreversibilidad de una evolución, es decir, al conservar información sólo sobre un conjunto reducido de observables, descartando aquella correspondiente a los operadores faltantes para cerrar la semialgebra.

No obstante, $S_{\bullet f}(t)$ no es una función monótonamente creciente, presentando oscilaciones por encima del valor inicial. Existe en realidad, un intercambio de información entre los observables relevantes y los descartados, que origina las oscilaciones. La derivada temporal de $S_{\bullet f}$ está dada por

$$dS_{\bullet f}/dt = -i \sum_{i=1}^k \lambda_i'(t) \langle [\hat{H}, \hat{O}_i] \rangle_{\bullet x} \quad (V.2.12)$$

donde el valor medio del conmutador es tomado respecto del operador densidad exacto. Notemos que la derivada temporal inicial de $S_{\bullet f}$ es nula, pues $\lambda_i'(t=0) = \lambda_i(t=0)$ y $\hat{\rho}_{\bullet f}(t=0) = \hat{\rho}(t=0)$, de modo que se cumple (V.2.4). La variación de $S_{\bullet f}$ es entonces un efecto de segundo orden, que sólo puede ser detectado por aproximaciones que involucren al menos la derivada segunda inicial correcta de los observables relevantes.

V.3 LA APROXIMACION ESTADISTICA DE HFDT EN SISTEMAS FERMIONICOS Y BOSONICOS

Las ecuaciones de movimiento autoconsistentes, si bien permiten aproximar la evolución exacta por un sistema cerrado de ecuaciones no lineales, son aún difíciles de resolver en el caso general. La relación (V.2.3) de inferencia estadística es usualmente difícil de hallar, así también como la vinculación entre multiplicadores y valores medios del conjunto de operadores relevantes.

No obstante, si todos los observables relevantes son operadores de un cuerpo, las dificultades anteriores se simplifican. En el capítulo II se han dado las relaciones generales entre valores medios y multiplicadores para estos operadores. Además, el teorema de Wick permite evaluar fácilmente el segundo miembro de (V.2.2) para un hamiltoniano general de m cuerpos.

Si el conjunto de operadores $\{\hat{O}_i, i=1, \dots, k\}$ abarca todos los operadores de un cuerpo cuyos valores medios aparecen en (V.2.2), las ecuaciones se reducen a las de HFDT (si se incluyen operadores del tipo $a_i^+ a_j^+$, $a_i a_j$, o sea, combinaciones lineales de los \hat{B}_{ij} (II.1.1b), las ecuaciones resultantes son en realidad las de Hartree-Fock Bogoliubov dependiente del tiempo). No obstante, el contexto es estadístico, por lo cual la matriz densidad de un cuerpo resultante no será idempotente. Las ecuaciones de HFDT pueden escribirse en la forma

$$\begin{aligned}
dO_i/dt &= i \langle [\hat{H}, \hat{O}_i] \rangle_{p.i.} \\
&= i \langle [\hat{h}, \hat{O}_i] \rangle, \quad i=1, \dots, k,
\end{aligned}
\tag{V.3.1}$$

donde \hat{h} es el hamiltoniano efectivo de campo medio utilizado en (I.5.24), y el valor medio es tomado respecto de un operador densidad general de p.i. (o c.i.). k es el número total de operadores de un cuerpo necesarios para cerrar el sistema (que debe incluir aquellos operadores que aparecen en la expresión de $\langle \hat{H} \rangle_{p.i.}$). La igualdad (V.3.1) puede deducirse a partir del teorema de Wick (ver apéndice (II.C)), al desarrollar el hamiltoniano en la forma (II.C.3) y utilizar la propiedad $\langle : \hat{O}_1 \dots \hat{O}_n : \hat{O}_i \rangle = 0$ si $n \geq 2$. El hamiltoniano efectivo es el mismo que interviene en la aproximación estática.

El efecto neto de restringir los observables relevantes a operadores de un cuerpo, es entonces el de reemplazar \hat{H} por un hamiltoniano efectivo de un cuerpo, con el cual sí es posible cerrar una semiálgebra. Esta propiedad permite mostrar fácilmente que las ecuaciones (V.3.1) conservan la energía media:

$$\begin{aligned}
d\langle \hat{H} \rangle / dt &= \sum_i \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial O_i} dO_i / dt \\
&= i \sum_i \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial O_i} \langle [\hat{h}, \hat{O}_i] \rangle \\
&= i \langle [\hat{h}, \hat{h}] \rangle \\
&= 0,
\end{aligned}
\tag{V.3.2}$$

lo cual no es siempre válido en aproximaciones autoconsistentes. Además, el valor medio de cualquier operador de un cuerpo que

conmute con \hat{H} se conserva obviamente, aunque no ocurre lo mismo con operadores de dos o más cuerpos. En estos casos, el valor medio se conserva sólo si el operador efectivo correspondiente conmuta con \hat{h} (véase (V.3.2)), o al menos, es nulo el valor medio del conmutador $\forall t$. La entropía permanece también invariante en virtud de las consideraciones generales de la sección anterior.

El sistema (V.3.1) es no lineal, pues $\langle [\hat{h}, \hat{O}_i] \rangle$ es un polinomio de grado n en los valores medios relevantes si \hat{H} contiene términos de n cuerpos. Obviamente, si \hat{H} es de un cuerpo, $\hat{h} = \hat{H}$, y la aproximación es exacta.

Consideremos a continuación un sistema fermiónico. Eligiendo los observables \hat{O}_i como los operadores elementales \hat{A}_{ij} , \hat{B}_{ij} , (II.1.1), la ecuación (V.1.1) puede reescribirse directamente en la forma matricial

$$dD/dt = -i [h, D] , \quad (V.3.3)$$

donde D es la matriz densidad de un cuerpo generalizada (II.2.6) y h la matriz que representa a \hat{h} (la cual depende a su vez de D). Para un operador de un cuerpo $\hat{O}_i = \frac{1}{2} Z^+ O^i Z$ arbitrario, utilizando (II.2.21), (II.A.25-26) y (V.3.1) se obtiene

$$\begin{aligned} dO_i/dt &= \text{tr} \left[\frac{dD}{dt} O^i \right] \\ &= i \text{tr} [D[h, O^i]] , \end{aligned} \quad (V.3.4)$$

lo cual puede emplearse para demostrar (V.3.3). En efecto, $\text{tr} [D[h, O^i]] = -\text{tr} [O^i[h, D]]$, y dado que \hat{O}_i es arbitrario, se obtiene (V.3.3). Notemos que esta ecuación es formalmente similar a la ecuación de Liouville (V.1.1), en el espacio de una

partícula.

La sólo forma de (V.3.3) implica la conservación de los autovalores de D . La aproximación no sólo conserva la entropía sino también todos los números de ocupación f_i (autovalores de D) de los que es función. (Si D es de $m \times m$, ($m=2L$), sus autovalores quedan determinados por la traza de $D^{(k)}$, $1 \leq k \leq m$, y a partir de (V.3.3), $d\text{Tr}[D^{(k)}]/dt = 0$). Esto implica que $D(t)$ es de la forma

$$D(t) = U(t)D(0)U^+(t), \quad (\text{V.3.5})$$

donde $D(0)$ es la matriz densidad inicial y U una transformación general de Bogoliubov (II.2.9) dependiente del tiempo, tal que $dU/dt = -i\hbar(D)U$. La aproximación es pues equivalente a encontrar una transformación óptima de c.i. dependiente del tiempo que haga estacionaria la acción (V.2.9).

A partir de (V.3.3) y la relación (II.2.15) se obtiene inmediatamente la ecuación de movimiento para los parámetros de Lagrange⁷:

$$\begin{aligned} M(t) &= -\ln\{D(t)^{-1} - I'\} \\ &= U(t)M(0)U^+(t), \end{aligned} \quad (\text{V.3.6})$$

de donde,

$$dM(t)/dt = -i[\hbar, M]. \quad (\text{V.3.7})$$

De este modo, λ_{ij} se 'comporta' como $\langle c_j^+ c_i \rangle$ y γ_{ij} como $\langle c_j^+ c_i^+ \rangle$. Desarrollando (V.3.3) explícitamente, se obtienen las ecuaciones

$$dA/dt = i\{[A, \hbar^{11}] + B\hbar^{20} - (\hbar^{20})^* B^*\}, \quad (\text{V.3.8a})$$

$$dB/dt = i\{-A\hbar^{20} - B(\hbar^{11})^* - \hbar^{11}B + (\hbar^{20})^*(I-A^*)\}, \quad (\text{V.3.8b})$$

donde hemos empleado la notación empleada en la sección II.5. Una expresión análoga a (V.3.8) es válida para Λ y Γ . Si se excluyen las contracciones de apareamiento B_{ij} , (V.3.3) y (V.3.7) se reducen obviamente a

$$dA/dt = -i [h^{11}, A] , \quad (V.3.9a)$$

$$d\Lambda/dt = -i [h^{11}, \Lambda] , \quad (V.3.9b)$$

o, explícitamente,

$$d\langle c_i^+ c_j \rangle / dt = -i \sum_l [h_{jl}^{11} \langle c_i^+ c_l \rangle - \langle c_l^+ c_j \rangle h_{li}^{11}] , \quad (V.3.10a)$$

$$d\lambda_{ij} / dt = -i \sum_l [h_{il}^{11} \lambda_{lj} - \lambda_{il} h_{lj}^{11}] . \quad (V.3.10b)$$

En un sistema bosónico las fórmulas anteriores sufren ligeras modificaciones. Si no existen traslaciones ($\langle Z \rangle = 0$), para un operador $\hat{O}_i = \frac{1}{2} Z^+ O^i Z$ arbitrario, se obtiene (véase (II.3.56), (II.B.32) y (V.3.1))

$$\begin{aligned} dO_i / dt &= \text{tr} \left[\frac{dD}{dt} O^i \right] \\ &= i \text{tr} [D (h \Pi O^i - O^i \Pi h)] \\ &= i \text{tr} [O^i (D h \Pi - \Pi h D)] , \end{aligned} \quad (V.3.11)$$

de modo que (V.3.3) se reemplaza por

$$(dD/dt) \Pi = -i [\Pi h, D \Pi] , \quad (V.3.12)$$

donde D es la matriz densidad de un cuerpo generalizada bosónica (II.3.43). La ecuación (V.3.12) conserva los autovalores de $D \Pi$ (iguales en módulo a los números de ocupación). $D(t)$ es entonces de la forma

$$D(t) = U(t)D(0)U^+(t) , \quad (V.3.13)$$

es decir, $D(t)\Pi = UD(0)\Pi U^{-1}$, donde U es una transformación óptima de Bogoliubov (II.3.34) dependiente del tiempo, tal que $dU/dt = -i\Pi h(D)U$. Para la matriz de multiplicadores de Lagrange, se obtiene a partir de (V.3.13),

$$\begin{aligned} \Pi M(t) &= -\ln\{[D(t)\Pi]^{-1} + I\}^{-1} \\ &= U(t)\Pi M(0)U^{-1}(t) , \end{aligned} \quad (V.3.14)$$

o sea, $M(t) = (U^{-1})^+ M(0)U^{-1}$. Por lo tanto,

$$\Pi dM/dt = -i [\Pi h, \Pi M] . \quad (V.3.15)$$

El desarrollo explícito de (V.3.12) conduce nuevamente al sistema (V.3.8) con el único reemplazo $(h^{20})^* (-I - A^*)$ en la ecuación para dB/dt . En caso de no existir contracciones B_{ij} , (V.3.12) y (V.3.15) se reducen nuevamente a las fórmulas (V.3.9), sin existir diferencia formal entre el caso fermiónico y bosónico.

Si existen además contracciones $\langle b^+ \rangle$, $\langle b \rangle$, no nulas, el hamiltoniano de campo medio \hat{h} contiene términos adicionales proporcionales a b^+ , b . La ecuación de movimiento para $\langle Z \rangle$ es

$$\begin{aligned} d\langle b_i \rangle / dt &= i \langle [\hat{h}, b_i] \rangle \\ &= -i \left\{ \sum_j [h_{ij}^{11} \langle b_j \rangle + (h_{ij}^{20})^* \langle b_j^+ \rangle] + h_i \right\} , \end{aligned} \quad (V.3.16)$$

lo que puede resumirse en la forma (véase (II.3.56) y (II.B.33))

$$\Pi d\langle Z \rangle / dt = -i \{ h\langle Z \rangle + \bar{h} \} , \quad (V.3.17)$$

donde

$$h_i = \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle b_i^+ \rangle} = \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \langle b_i \rangle^*}, \quad (V.3.18)$$

$$(\vec{h}^+) = (h_1^*, \dots, h_L^*, h_1, \dots, h_L) . \quad (V.3.19)$$

La ecuación de movimiento de la matriz D también se modifica, quedando acoplada a la de $\langle Z \rangle$. No obstante, escribiendo las ecuaciones de movimiento en términos de la dispersión $D^c = D - \langle Z \rangle \langle Z^+ \rangle$, éstas se desacoplan formalmente, satisfaciendo D^c la ecuación (V.3.12). Sin embargo, las ecuaciones (V.3.12) y (V.3.17) se encuentran ahora acopladas a través del hamiltoniano de campo medio, que depende tanto de D como de Z : $h(D, \langle Z \rangle)$, $\bar{h}(D, \langle Z \rangle)$.

La matriz M depende sólo de D^c , por lo que (V.3.15) sigue siendo válida. Los restantes multiplicadores η satisfacen una ecuación similar a (V.3.17).

V.4 SOLUCIONES ESTACIONARIAS Y ECUACIONES LINEALIZADAS

Valores medios estacionarios corresponden a operadores $\hat{\rho}_0$ tales que

$$\begin{aligned} \langle [\hat{h}, \hat{O}_i] \rangle_0 &\equiv \text{Tr}[\hat{\rho}_0 [\hat{h}, \hat{O}_i]] \\ &= 0, \quad i=1, \dots, k, \end{aligned} \quad (\text{V.4.1})$$

lo que equivale en el caso fermiónico a

$$[\hat{h}, D_0] = 0, \quad (\text{V.4.2})$$

donde D_0 es la matriz densidad de un cuerpo correspondiente a $\hat{\rho}_0$. El operador estadístico $\hat{\rho}_0$ describe pues, una configuración de equilibrio dentro de la aproximación de campo medio. Notemos que operadores estadísticos de la forma

$$\hat{\rho}_0 = \exp\{\lambda_0 - \beta \hat{h}\}, \quad (\text{V.4.3})$$

son estacionarios, pues conmutan con \hat{h} . También lo es $\hat{\rho}_0 = \exp\{\lambda_0 - \beta \hat{h} - \mu \hat{N}\}$ si son nulas las contracciones $\langle a_i^+ a_j^+ \rangle$, pues en este caso $[\hat{h}, \hat{N}] = 0$. Por consiguiente, las soluciones de Hartree-Fock térmico son soluciones estacionarias. En general, las soluciones autoconsistentes estadísticas generales son estacionarias si los correspondientes operadores efectivos conmutan con \hat{h} .

Más genéricamente, la ecuación (V.4.2) puede derivarse a partir de hacer estacionario $\langle \hat{H} \rangle$ respecto de variaciones δD_{ij} que conserven los autovalores de D , es decir, del tipo

$$\delta D \propto [W, D], \quad (\text{V.4.4})$$

$$\begin{aligned}
\delta\langle\hat{H}\rangle &\propto \sum_{i,j} h_{ji} [W,D]_{ij} \\
&= \sum_{i,j} W_{ij} [D,h]_{ji} \\
&= \text{tr}[W[D,h]] ,
\end{aligned}
\tag{V.4.5}$$

donde $h_{ji} = \partial\langle\hat{H}\rangle/\partial D_{ij}$ es el correspondiente elemento de la matriz que representa a \hat{h} . La condición $\delta\langle\hat{H}\rangle = 0$ para variaciones arbitrarias W implica $[D,h] = 0$. En el caso bosónico, para traslaciones nulas, las variaciones son del tipo $\delta D\Pi = [W,D\Pi]$, de modo que $\delta\langle\hat{H}\rangle = \text{tr}[W[\Pi h, D\Pi]]$, obteniéndose en el caso estacionario, $0 = [\Pi h, D\Pi]$.

Para obtener una idea aproximada del comportamiento de las soluciones de HFDT, es posible linealizar el sistema (V.3.3) o (V.3.10) alrededor de una solución estacionaria. Las ecuaciones resultantes,

$$d(\delta O_i)/dt = \sum_{j=1}^k \frac{\partial \langle [\hat{h}, \hat{O}_i] \rangle_0}{\partial O_j^0} \delta O_j , \tag{V.4.6}$$

donde $O_i = O_i^0 + \delta O_i$, siendo O_i^0 el valor medio estacionario, y δO_i pequeños desplazamientos a partir de la posición de equilibrio, forman un sistema de ecuaciones lineales, cuyas autofrecuencias son las frecuencias de RPA¹ (aproximación de fases al azar) del sistema. A diferencia del caso puro, donde éstas eran funciones únicamente de las constantes de acoplamiento del sistema, dentro del presente contexto estadístico dependerán además de los valores estacionarios O_i^0 , los cuales no quedan completamente determinados por las constantes de acoplamiento. Existe un 'continuo' de soluciones estacionarias (véase por ej., cap. VI), aún para un mismo valor de la entropía y parámetros del potencial, de modo que

las frecuencias dependen de los valores iniciales, a través de la elección de la solución estacionaria más próxima.

Una solución estacionaria es estable, si las correspondientes frecuencias propias del sistema (V.4.6) son todas reales. Así, para pequeños desplazamientos a partir de la configuración de equilibrio, el comportamiento será aproximadamente oscilante. No obstante, si al menos una de las frecuencias propias es compleja, la correspondiente solución estacionaria no es estable para desplazamientos δQ_i que involucren esta frecuencia (las frecuencias propias de (V.4.6) aparecen en pares $\pm \omega$). Sólo puede ocurrir estabilidad en este caso para valores iniciales de los δQ_i muy particulares en los cuales sólo los modos proporcionales a $\{-|\text{Im}(\omega_i)|t\}$ son excitados, experimentando los apartamientos iniciales un decaimiento exponencial.

V.5 INFERENCIA ESTADISTICA Y TRUNCAMIENTO EN HFDT

Para resolver las ecuaciones (V.3.1), es necesario en principio conocer los valores medios iniciales de todos los operadores de un cuerpo que entran en la clausura de la semiálgebra con \hat{h} . Sin embargo, dentro del presente contexto estadístico general, es posible obtener resultados aún en el caso de información incompleta, apelando a la inferencia estadística y a la maximización de la entropía. Asignando los valores $\lambda_j = 0$ para aquellos observables cuyos valores medios O_j sean desconocidos inicialmente, es posible construir el operador densidad inicial, y obtener de este modo los valores medios faltantes, en forma similar a la sección (II.4).

Inclusive, es posible obtener resultados aún en el caso en que la información inicial disponible no provenga únicamente de observables de un cuerpo. Si el conocimiento inicial sobre el sistema se compone de los valores medios de m observables arbitrarios \hat{P}_i , no necesariamente de un cuerpo, el operador densidad inicial en la aproximación de cuasipartícula independiente puede ser determinado en la forma discutida en las secciones (I.4) y (II.5-6), o sea,

$$\hat{\rho}(t=0) = \exp\{\lambda_0 + \sum_{j=1}^m \beta_j \hat{P}_j\} , \quad (V.5.1)$$

donde \hat{p}_i es el operador efectivo (I.4.9),

$$\hat{p}_j = \sum_i \frac{\partial \langle \hat{P}_j \rangle}{\partial O_i} \hat{O}_i . \quad (V.5.2)$$

Mediante el operador (V.5.1), puede obtenerse la matriz

densidad de un cuerpo inicial completa con la cual resolver el sistema (V.3.1). En principio, el conjunto de operadores de un cuerpo \hat{O}_i que son utilizados en la suma en (V.5.2), debe incluir todo operador disponible en el sistema en cuestión, para que la aproximación sea lo más amplia y precisa posible, aunque en muchos casos una aproximación razonable puede ser obtenida utilizando un conjunto reducido de observables relevantes de un cuerpo.

Volviendo al problema de la evolución temporal, hasta ahora hemos supuesto que todos los operadores que aparecen en el miembro derecho de (V.3.1) son incluidos en el exponente del operador estadístico para todo tiempo $t > 0$, cerrando así la semiálgebra con $\hat{h}(D)$. El número de ecuaciones resultantes puede sin embargo, llegar a ser aún muy elevado.

No obstante, dentro del presente contexto estadístico, es posible truncar las ecuaciones de HFDT de una manera autoconsistente⁷, adoptando la filosofía de la sección V.2. Es posible reducir a todo tiempo t el número de operadores de un cuerpo que aparecen en el exponente de $\hat{\rho}$, conservando sólo aquellos observables que se consideren relevantes. Así, para un conjunto reducido de operadores relevantes de un cuerpo $\{\hat{O}_i, i=1, \dots, k\}$, la aproximación restringida de HFDT implica

$$\hat{\rho}(t) = \exp\{\lambda_0(t) + \sum_{i=1}^k \lambda_i(t) \hat{O}_i\}, \quad (V.5.3)$$

$$d\hat{O}_i/dt = \langle [\hat{H}, \hat{O}_i] \rangle_{p.i.}$$

$$= \langle [\hat{h}, \hat{O}_i] \rangle$$

$$= \text{tr}[D[h, O_i]] , \quad i = 1, \dots, k, \quad (V.5.4)$$

Los valores de expectación de aquellos operadores de un cuerpo removidos del exponente se expresan por medio de (V.2.3), y dejan de ser variables independientes, siendo determinados por los valores medios relevantes. Desde luego, estos valores inferidos no satisfarán en general el teorema de Ehrenfest, como ocurre en la aproximación completa de HFDT con los operadores de dos o más cuerpos.

Dado que en la aproximación restringida el operador \hat{O}_i en (V.3.4) no es arbitrario, la matriz densidad D no satisfará en general la ecuación (V.3.3). Por lo tanto, es importante remarcar que la conservación de los autovalores de D dejará en general de ser válida en la aproximación restringida. Sin embargo, la entropía seguirá siendo una constante de movimiento en virtud de la autoconsistencia de la aproximación.

Las ecuaciones de HFDT restringidas no son pues equivalentes a una transformación óptima de Bogoliubov. Más aún, el valor medio de \hat{H} (o, en general, un operador \hat{P} conservado en HFDT) se conservará sólo si los operadores removidos no aparecen en la expresión de \hat{H} (\hat{P}). Resulta obvio que operadores que jueguen un rol preponderante en el hamiltoniano no pueden ser considerados irrelevantes.

Los operadores excluidos pueden ser por ej., un subconjunto de operadores elementales correspondientes a estados de una partícula inaccesibles en la práctica, o a transiciones improbables. Si los operadores removidos son tales que la correspondiente matriz de multiplicadores M queda bloqueada en submatrices sin elementos nulos 'a priori' en la diagonal, y restantes elementos nulos, la inferencia estadística resulta

trivial, asignando el valor 0 a los operadores removidos. En caso contrario, el valor inferido será en general una función no lineal de los valores medios relevantes.

Del mismo modo que en la sección (V.2), podemos construir un operador estadístico reducido efectivo

$$\hat{\rho}_r(t) = \exp\{\lambda_o^r(t) + \sum_{i=1}^k \lambda_i^r(t) \hat{O}_i\}, \quad (V.5.5)$$

que reproduzca los valores medios correspondientes al tratamiento completo de HFDT de los observables relevantes. De este modo, la magnitud

$$S_r(t) = -(\lambda_o^r(t) + \sum_{i=1}^k \lambda_i^r(t) O_i), \quad (V.5.6)$$

provee una medida de la bondad de la aproximación restringida respecto de la evolución completa de HFDT. En la medida en que la diferencia $S_r(t) - S_r(0)$ sea pequeña, la trayectoria de HFDT permanecerá próxima a la correspondiente a la aproximación restringida. De la misma manera que en (V.2), puede verse que $S_r(t) \geq S_r(0)$, $dS_r(t)/dt|_{t=0} = 0$, si el operador restringido (V.5.3) coincide con el de HFDT a $t=0$.

Referencias:

1. P. Ring and P. Schuck, 'The Nuclear Many Body Problem' (Springer Verlag, N.Y., 1980).
A. de Shalit and H. Feshbach, 'Theoretical Nuclear Physics' (Wiley, N.Y., 1974).
J. W. Negele, Rev. Mod. Phys. 54, 913 (1982).
2. S. Krieger, Nucl. Phys. A 276, 12 (1977).
3. K. K. Kan, P. C. Lichtner, M. Dworzecka and J. Griffin, Phys. Rev. C 21, 1098 (1980).
K. K. Kan, P. C. Lichtner, M. Dworzecka, Nucl. Phys. A 334, 198 (1980).
A. Blin, B. Hiller, J. Griffin and M. Dworzecka, Nucl. Phys. A 440, 62 (1985).
4. F. Villars, Nucl. Phys. A 285, 269 (1977).
5. P. Kramer and M. Saraceno, 'Geometry of the Time Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics' (Springer Verlag, Berlin, 1981).
6. N. Canosa, A. Lopez, A. Plastino and R. Rossignoli, Phys. Rev. C (en prensa).
7. R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. C (en prensa).
8. R. Balian, Y. Alhassid and H. Reinhardt, Phys. Rep. 131, 1 & 2 (1986).
9. H. Reinhardt, R. Balian and Y. Alhassid, Nucl. Phys. A 413, 475 (1984).
10. P. Buck and H. Feldmeier, Phys. Lett. 129 B, 172 (1983).
11. D. Otero, A. Plastino, A. Proto and G. Zannoli, Phys. Rev. A 26, 1209 (1982).

12. Y. Alhassid and R. D. Levine, Phys. Rev. A 18 (1978).
13. N. Canosa, A. Lopez, D. Otero, A. Plastino and A. Proto, Z. Phys. A 32, 195 (1987).
14. R. Balian and M. Veneroni, Phys. Rev. Lett. 47, 1353, 1765 (1981).

CAPITULO VI

APLICACION A UN MODELO $U(N)$

INTRODUCCION

En este capítulo, basado en la ref. 1, ilustraremos las ideas presentadas en el cap. precedente en un modelo fermiónico exactamente soluble de simetría $U(n)$, que constituye la extensión a n niveles del modelo utilizado en el cap. III. Este modelo ha sido utilizado en diversos estudios teóricos sobre la validez de distintas aproximaciones²⁻⁴, en situaciones donde se pretende trabajar con un mayor grado de complejidad. En nuestro caso particular, la necesidad de ilustrar ciertos aspectos no triviales relacionados con la inferencia estadística exige considerar el caso $n > 2$.

La descripción del modelo y el tratamiento general estadístico son realizadas en las secciones (VI.1-4), incluyendo la evolución exacta del sistema y la dada por HFDT. Se examina además la posibilidad de trabajar directamente en un conjunto estadístico del tipo canónico, es decir, con un número fijo de partículas. La inferencia estadística y la aproximación restringida de HFDT son consideradas en la secc. (VI.5), discutiéndose resultados numéricos para el caso $n = 3$ en la secc. (VI.6).

VI.1 DESCRIPCION DEL MODELO

El modelo representa un sistema de N fermiones distribuidos en n niveles de p.i., cada uno 2Ω veces degenerado. Los estados de una partícula serán denotados por $|p,i\rangle$, $p=1,\dots,2\Omega$, $i=1,\dots,n$, y la energía de cada nivel por ϵ_i , con $\epsilon_i \leq \epsilon_j$ si $i \leq j$. En este contexto, se definen los n^2 operadores colectivos

$$\hat{G}_{ij} = \sum_{p=1}^{2\Omega} c_{pi}^+ c_{pj}, \quad (\text{VI.1.1})$$

donde c_{pi}^+ (c_{pi}) crea (destruye) un fermión en el estado $|p,i\rangle$. Estos operadores poseen relaciones de conmutación características de un álgebra de Lie,

$$[\hat{G}_{ij}, \hat{G}_{kl}] = \hat{G}_{il} \delta_{kj} - \hat{G}_{kj} \delta_{il}, \quad (\text{VI.1.2})$$

y representan los generadores del grupo $U(n)$ (grupo de matrices unitarias de $n \times n$). Si se excluye el operador número

$$\hat{N} = \sum_i \hat{G}_{ii}, \quad (\text{VI.1.3})$$

el álgebra correspondiente se reduce a $SU(n)$ (grupo de matrices unitarias de determinante +1).

Tanto el hamiltoniano como los observables considerados relevantes se suponen que son funciones de los operadores (VI.1.1), los que juegan el rol, en este contexto, de los operadores 'elementales' \hat{A}_{ij} del cap. II. De este modo, definiremos una matriz G (de $n \times n$) de elementos $G_{ji} = \langle \hat{G}_{ij} \rangle$, relacionada con la matriz densidad de un cuerpo por

$$A_{qj,pi} = \langle c_{pi}^+ c_{qj} \rangle = \delta_{pq} G_{ji} / 2\Omega$$

$$\equiv \delta_{pq} g_{ji} , \quad (VI.1.4)$$

donde $g_{ji} = G_{ji} / 2\Omega$ representa el valor medio intensivo de \hat{G}_{ij} . El operador estadístico más general de p.i. será de la forma¹

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 + \sum_{i,j} \lambda_{ij} \hat{G}_{ij}\} , \quad (VI.1.5)$$

con multiplicadores independientes del índice p.

Trabajaremos en un conjunto de tipo canónico, considerando como estados accesibles sólo aquellos en los cuales los 2Ω operadores

$$\hat{N}_p = \sum_{i=1}^n c_{pi}^+ c_{pi} , \quad (VI.1.6)$$

toman el valor 1. Esta elección corresponde al caso en que se posee la información certera de que el sistema no se encuentra en un estado 'apareado' (es decir, con $N_p = 0, 2, 3, \dots, n$). Notemos que los operadores (VI.1.6) conmutan con todos los operadores (VI.1.1), de modo que la ocupación de estos estados no será estimulada por funciones de estos operadores. El subespacio de estados accesibles posee en consecuencia dimensión n^N , donde

$$N = \sum_{i=1}^n G_{ii} = 2\Omega , \quad (VI.1.7)$$

es el número total de partículas presentes (La dimensión total para N fijo es $\binom{2n\Omega}{N}$).

En este tipo de conjunto, es posible realizar un tratamiento estadístico de p.i. sin dificultad. En el apéndice A, se muestra

que la relación general entre los multiplicadores λ_{ij} y los valores medios G_{ij} está dada por

$$G = N \exp\{\Lambda\} . \quad (\text{VI.1.8})$$

donde Λ es la matriz de multiplicadores. La restricción $\text{Tr}[G] = N$ impone la condición $\text{Tr}[\exp\{\Lambda\}] = 1$, lo que conduce a su vez a $\lambda_0 = 0$. Para los números medios de ocupación g_i (autovalores de g) se obtiene por consiguiente,

$$\begin{aligned} g_i &= \exp(\lambda_i) / \sum_j \exp(\lambda_j) \\ &= G_i / N , \end{aligned} \quad (\text{VI.1.9})$$

donde λ_i denota los autovalores de la matriz Λ . Las expresiones (VI.1.8-9) generalizan a n niveles las expresiones (III.8.3-4), y difieren obviamente de aquellas que corresponderían a un conjunto gran canónico,

$$G = N[I + \exp\{-\Lambda\}]^{-1}, \quad (\text{VI.1.10})$$

en virtud del subespacio de estados accesibles considerado. En el apéndice A se muestra también la forma explícita de la relación (VI.1.8) para el caso $n = 3$, y se establecen las restricciones correspondientes a la validez del teorema de Wick para el cálculo de valores medios de operadores de m cuerpos respecto del operador (VI.1.5) en el espacio restringido.

La entropía adopta la expresión

$$\begin{aligned} S &= - \sum_{i,j} \lambda_{ij} G_{ji} = -\text{tr}[\Lambda G] \\ &= -N \text{tr}[g \ln(g)] , \end{aligned} \quad (\text{VI.1.11})$$

que en términos de autovalores puede escribirse en la forma

$$S = -\sum_i G_i \lambda_i = -N \sum_i q_i \ln(q_i) , \quad (\text{VI.1.12})$$

la cual no coincide con la forma usual de p.i. (II.1.16). En realidad, (VI.1.12) se asemeja a una situación equivalente con 2Ω estados 'p' (de una partícula) que pueden ocuparse de 'varias' (n) maneras diferentes (fraccionarias), en lugar de las dos usuales (vacío o ocupado).

La entropía queda determinada únicamente por los valores de expectación de los n operadores de Casimir (aquellos que conmutan con todos los operadores (VI.1.1))

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= \sum_{i=1}^n \hat{G}_{ii} = \hat{N}, \\ \hat{C}_2 &= \sum_{i,j} \hat{G}_{ij} \hat{G}_{ji} , \\ &\dots \\ \hat{C}_n &= \sum_{i_1, \dots, i_r} \hat{G}_{i_1 i_1} \hat{G}_{i_2 i_2} \dots \hat{G}_{i_r i_r} , \quad 1 \leq r \leq n, \end{aligned} \quad (\text{VI.1.13})$$

cuyos valores medios quedan determinados a su vez por las n cantidades

$$\gamma_r = \text{tr}[G^r] , \quad r = 1, \dots, n, \quad (\text{VI.1.14})$$

que fijan obviamente el valor de los autovalores G_i . La entropía es, pues, claramente un escalar, invariante frente a transformaciones unitarias de un cuerpo. S adquiere el valor máximo cuando $G_i = N/n$, que corresponde a una distribución uniforme de partículas sobre n niveles, en cuyo caso,

$$S = S_{\max} = N \ln(n) . \quad (\text{VI.1.15})$$

La matriz G es en este caso siempre diagonal.

Por el contrario, estados puros ocurren si $G_i = N \delta_{ij}$, para un dado nivel j completamente ocupado. En este caso, $S = 0$, y

$$\hat{\rho} = |\psi(\vec{x})\rangle \langle \psi(\vec{x})|, \quad (\text{VI.1.16})$$

donde $|\psi(\vec{x})\rangle$ es un D.S. arbitrario en la representación irreducible completamente simétrica de $U(n)$ (véase apéndice B). La matriz ρ resulta en este caso idempotente.

El hamiltoniano específico que estudiaremos en este modelo es de la forma^{2,15}

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{i,p} \epsilon_i c_{pi}^+ c_{pi} + \frac{1}{2} \sum_{i < j} v_{ij} \sum_{p,q} c_{pi}^+ c_{qi}^+ c_{qj} c_{pj} \\ &= \sum_i \epsilon_i \hat{G}_{ii} + \sum_{i,j} v_{ij} (\hat{G}_{ij}^2 + \hat{G}_{ji}^2) \\ &= \hat{H}_0 + \hat{V}, \end{aligned} \quad (\text{VI.1.17})$$

donde \hat{H}_0 es el hamiltoniano no perturbado, \hat{V} la interacción monopolar entre los niveles, con $v_{ij} = v_{ji}$ (reales). (VI.1.17) constituye la extensión a n niveles del hamiltoniano monopolar definido en (III.1.12) (con $G = 0$). Debido a la forma de la interacción, el teorema de Wick usual puede aplicarse sin restricciones para el cálculo de la energía media. En el apéndice B, se dan las soluciones de HF a $T=0$ para algunos casos particulares.

El modelo presente puede interpretarse⁵ como un sistema nuclear de n niveles, donde el estado fundamental no perturbado es un estado de capa cerrada (2Ω es la degeneración de la capa). A diferencia del modelo $U(2)$, el sistema posee en este caso, varios

$(n-1)$ modos de excitación, los cuales interaccionan entre sí y con el estado fundamental a través del hamiltoniano monopolar. Para $n=3$, el modelo es pues no trivial, con dos modos de excitación interactuantes. En el caso $V_{ij} = V(1-\delta_{ij})$, se muestran en el apéndice B, 13 soluciones diferentes de HF que el sistema posee a $T = 0$, siendo además algunas degeneradas.

Notemos que el modelo presenta otra característica común a casos realistas, que es la del rápido incremento de estados accesibles al aumentar N . Así, para $n = 3$, el sistema posee 81 estados accesibles si $N = 4$, y 6561 si $N = 8$.

VI.2 LA EVOLUCION TEMPORAL EXACTA

El cálculo de la evolución temporal exacta del operador densidad⁴ puede ser realizado mediante la diagonalización de \hat{H} y $\hat{\rho}$ dentro del subespacio de estados accesibles. Todo operador que es función de los \hat{G}_{ij} puede ser diagonalizado descomponiendo los n^N estados accesibles en las correspondientes representaciones irreducibles de $U(n)$ (véase ap. C). De este modo, los estados pueden ser clasificados en la forma $|r, L\rangle$, donde r denota la representación irreducible a la cual pertenece el estado y L identifica un estado en esa representación.

EL índice r es una abreviatura para (r_1, \dots, r_n) , con $r_i \geq r_j$ si $i \leq j$ (números cuánticos de partición), y L para (n_1, \dots, n_n, m) , siendo n_i el número de partículas que ocupa el nivel i ($\sum_{i=1}^n n_i = N$). El índice m es empleado con el fin de distinguir estados con iguales valores de los n_i . En la representación irreducible completamente simétrica $(r_1, \dots, r_n) = (N, 0, \dots, 0)$, m no es necesario, pues n_1, \dots, n_n bastan para identificar unívocamente al estado. Otras formas alternativas de clasificar los estados accesibles, por ej., basadas en subgrupos particulares, son por supuesto también posibles.

Cada representación caracterizada por el índice r , posee a su vez una cierta multiplicidad $M(r)$, que indica el número de veces que está contenida dentro del subespacio de estados accesibles. Por lo tanto se necesita un tercer índice α , $1 \leq \alpha \leq M(r)$, para caracterizar unívocamente a un estado. Esta multiplicidad se origina en una simetría adicional: todo operador \hat{G}_{ij} conmuta con los $2\Omega!$ operadores de permutación que intercambian el índice p . El

índice α denota pues los miembros de la representación irreducible de $S_{2\Omega}$ a la que pertenece el estado $|r, L\rangle$. No obstante, ningún observable basado en los operadores \hat{G}_{ij} será sensible a α , por lo que el único efecto visible es la multiplicidad $M(r)$ (para más detalles véase apéndice C y ref. 6,7).

Tanto $\hat{\rho}$ como \hat{H} son diagonales en r y α , y deben pues, ser diagonalizados dentro de cada multiplete de $U(n)$. A $t = 0$, el operador densidad puede escribirse en la forma

$$\hat{\rho}(0) = \sum_{r, I, \alpha} |r, I, \alpha\rangle \exp(\lambda_I^r) \langle r, I, \alpha|, \quad (\text{VI.2.1})$$

donde $|r, I, \alpha\rangle$ denota los elementos de la base de autoestados de $\hat{\rho}$, vinculada con la base no perturbada $|r, L, \alpha\rangle$ mediante una transformación unitaria

$$|r, I, \alpha\rangle = \sum_L A_{IL}^r(0) |r, L, \alpha\rangle, \quad (\text{VI.2.2})$$

y λ_I^r el correspondiente autovalor de $\ln(\hat{\rho})$. La forma (VI.2.1) es válida para cualquier tipo de operador densidad inicial que sea función de los operadores (VI.1.1). Para el cálculo de valores medios de estos operadores, (VI.2.1) tiene el mismo efecto que

$$\hat{\rho}'(0) = \sum_{r, I} M(r) |r, I\rangle \exp(\lambda_I^r) \langle r, I|. \quad (\text{VI.2.3})$$

Del mismo modo, si $|r, J, \alpha\rangle$ denota los elementos de la base de autoestados de \hat{H} , podemos escribir

$$|r, J, \alpha\rangle = \sum_L B_{JL}^r |r, L, \alpha\rangle. \quad (\text{VI.2.4})$$

La evolución temporal exacta de $\hat{\rho}$ está dada por

$$\hat{\rho}(t) = \exp(-i \hat{H}t) \hat{\rho}(0) \exp(i \hat{H}t)$$

$$= \sum_{r, I, \alpha} |r, I, \alpha\rangle_t \exp(\lambda_I^r) \langle r, I, \alpha|_t, \quad (\text{VI.2.5})$$

donde

$$|r, I, \alpha\rangle_t = \sum_L A_{IL}^r(t) |r, L, \alpha\rangle, \quad (\text{VI.2.6})$$

y

$$A_{IL}^r(t) = \sum_J B_{JL}^r \exp(-i E_J^r t) C_{JI}^r, \quad (\text{VI.2.7})$$

$$C_{JI}^r = \langle r, J, \alpha | r, I, \alpha \rangle = \sum_L (B_{JL}^r)^* A_{IL}^r(0). \quad (\text{VI.2.8})$$

El valor medio de un operador \hat{O} , función de los \hat{G}_{ij} , puede expresarse como

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle_t &= \text{Tr}[\hat{\rho}(t) \hat{O}] \\ &= \sum_r M(r) \sum_{LL'} \rho_{LL'}^r(t) O_{L'L}^r, \end{aligned} \quad (\text{VI.2.9})$$

donde

$$\begin{aligned} \rho_{LL'}^r(t) &= \langle r, L, \alpha | \hat{\rho}(t) | r, L', \alpha \rangle \\ &= \sum_I A_{IL}^r(t) \exp(\lambda_I^r) (A_{IL'}^r(t))^*, \end{aligned} \quad (\text{VI.2.10})$$

$$O_{LL'}^r = \langle r, L, \alpha | \hat{O} | r, L', \alpha \rangle. \quad (\text{VI.2.11})$$

La entropía exacta

$$\begin{aligned} S &= -\text{Tr}[\hat{\rho}(t) \ln \hat{\rho}(t)] \\ &= -\sum_{r, I} M(r) \lambda_I^r \ln(\lambda_I^r), \end{aligned} \quad (\text{VI.2.12})$$

es por su puesto, una constante de movimiento, al igual que todos los autovalores λ_I^r , y coincide con (VI.1.11) si $\hat{\rho}$ es inicialmente un operador de la forma (VI.1.5).

VI.3 LA APROXIMACION ESTADISTICA DE HFDT

Como se ha visto en el Cap. V, en esta aproximación el operador densidad es restringido a la forma (VI.1.5) para todo tiempo t . El valor medio del hamiltoniano (VI.1.17) respecto de (VI.1.5) es, utilizando el teorema de Wick,

$$\langle \hat{H} \rangle = N \left\{ \sum_i \epsilon_i q_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} (q_{ij}^2 + q_{ji}^2) \right\}, \quad (\text{VI.3.1})$$

y el correspondiente hamiltoniano efectivo de campo medio

$$\hat{h} = \sum_i \epsilon_i \hat{G}_{ii} + \sum_{i \neq j} (v_{ij}/N) (G_{ji} \hat{G}_{ij}), \quad (\text{VI.3.2})$$

donde $v_{ij} = (N-1)V_{ij}$. Las ecuaciones de HFDT son en este caso⁴,

$$\begin{aligned} -i \frac{dq_{ji}}{dt} &= (\epsilon_i - \epsilon_j) q_{ji} + v_{ji} q_{ij} (q_{jj} - q_{ii}) \\ &+ \sum_k (1 - \delta_{ki}) (1 - \delta_{kj}) (v_{ki} q_{ik} q_{jk} - v_{jk} q_{ki} q_{kj}), \end{aligned} \quad (\text{VI.3.3})$$

existiendo un sistema de ecuaciones similar para la evolución temporal de los λ_{ij} (véase (V.3.9b)),

$$\begin{aligned} -i \frac{d\lambda_{ji}}{dt} &= (\epsilon_i - \epsilon_j) \lambda_{ji} + v_{ji} q_{ij} (\lambda_{jj} - \lambda_{ii}) \\ &+ \sum_k (1 - \delta_{ki}) (1 - \delta_{kj}) (v_{ki} q_{ik} \lambda_{jk} - v_{jk} \lambda_{ki} q_{kj}), \end{aligned} \quad (\text{VI.3.4})$$

y $d\lambda_o/dt = 0$. Conviene remarcar que las ecuaciones (VI.3.3) y (VI.3.4) son válidas tanto en el conjunto canónico como en el gran canónico, dada la forma de la interacción. Los invariantes dinámicos del sistema (VI.3.3) son las cantidades (VI.1.14). Las correspondientes ecuaciones para los λ_{ij} conservan las cantidades

análogas $\text{tr}[\Lambda^m]$, $m = 1, \dots, n$. Obviamente, lo anterior equivale a la conservación de los autovalores g_i , λ_i . La energía media (VI.3.1) es también conservada.

Las ecuaciones (VI.3.3) son independientes de N para v_{ij} fijo. Constituyen el límite clásico de la solución exacta, que ocurre en este tipo de modelos cuando $N \rightarrow \infty$ (o sea, $\Omega \rightarrow \infty$). Los operadores intensivos $\hat{g}_{ij} = \hat{G}_{ij}/N$, conmutan en este límite,

$$[\hat{g}_{ij}, \hat{g}_{kl}] = \frac{1}{N} \{ \hat{g}_{il} \delta_{jk} - \hat{g}_{kj} \delta_{il} \}, \quad (\text{VI.3.5})$$

y por lo tanto (VI.3.3) constituye el límite termodinámico de la evolución exacta para las magnitudes intensivas g_{ij} .

Esta equivalencia para $N \rightarrow \infty$ ocurre también para la aproximación térmica o, en general, estadística estática de p.i. El factor de multiplicidad posee la importante propiedad

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln[M(r)]}{N} = - \sum_i f_i \ln(f_i), \quad (\text{VI.3.6})$$

donde $f_i = \lim_{N \rightarrow \infty} r_i/N$. (VI.3.6) coincide con la expresión de p.i. (VI.1.12) al identificar el número cuántico de partición intensivo r_i/N con el número medio de ocupación (VI.1.9). Valen por consiguiente las consideraciones del Cap. III sobre la exactitud de la aproximación de p.i. en el límite termodinámico. Las trazas pueden reemplazarse en este límite por integrales sobre f_i y el correspondiente ángulo sólido de $U(n)$, y la integral evaluarse por medio del método de Laplace. El resultado para valores medios intensivos coincide con el proporcionado por las aproximaciones estadísticas de p.i..

VI.4 ECUACIONES LINEALIZADAS Y SOLUCIONES ESTACIONARIAS

La forma de las soluciones del sistema (VI.3.3) depende fuertemente de los valores iniciales y del valor de las constantes de acoplamiento. Con el objeto de poseer una idea aproximada del comportamiento de las soluciones, el sistema (VI.3.3) puede ser linealizado en la forma (V.4.6) alrededor de una solución estacionaria, representada por g° ($[h, g^{\circ}] = 0$). Escribiendo $g_{ij} = g_{ij}^{\circ} + \delta g_{ij}$, y conservando el primer orden en δg , se obtiene

$$-i \frac{d(\delta g_{ji})}{dt} = (\varepsilon_i - \varepsilon_j) \delta g_{ji} + \sum_k \{ v_{ki} (\delta g_{ik} g_{jk}^{\circ} + g_{ik}^{\circ} \delta g_{jk}) - v_{jk} (\delta g_{ki} g_{kj}^{\circ} + g_{ki}^{\circ} \delta g_{kj}) \} . \quad (VI.4.1)$$

La matriz g° debe satisfacer la condición estacionaria

$$0 = (\varepsilon_i - \varepsilon_j) g_{ji}^{\circ} + v_{ij} g_{ij}^{\circ} (g_{jj}^{\circ} - g_{ii}^{\circ}) + \sum_k (1 - \delta_{ki}) (1 - \delta_{kj}) (v_{ki} g_{ik}^{\circ} g_{jk}^{\circ} - v_{jk} g_{ki}^{\circ} g_{kj}^{\circ}) , \quad (VI.4.2)$$

para todo i, j . Las ecuaciones linealizadas (VI.4.1) conservan las correspondientes expresiones linealizadas de la energía, entropía y 'Casimires' (VI.1.14), dependiendo las frecuencias propias tanto de v_{ij} como de la solución estacionaria empleada.

A diferencia del caso puro tratado en el Ap. B, donde existe un número finito de soluciones estacionarias, en un contexto estadístico existe un continuo de soluciones de (VI.4.2), pues los elementos de g no están restringidos por la condición (VI.B.4). Estas pueden clasificarse de acuerdo al número de elementos no diagonales no nulos, o sea, el número de niveles que participan de

la dinámica. En primer lugar, se obtienen las soluciones 'no perturbadas' (o de $U(1)$),

$$g_{ij}^0 = 0, \quad i \neq j, \quad (\text{VI.4.3})$$

con g_{ii}^0 arbitrario. Estas soluciones constituyen la generalización estadística de las soluciones (VI.B.19), correspondiendo a matrices g diagonales pero no necesariamente idempotentes. Reemplazando (VI.4.3) en (VI.4.1), se obtienen las soluciones oscilatorias

$$\delta g_{ij}(t) = A \exp\{i\omega_{ij}t\} + B\{-i\omega_{ij}t\}, \quad (\text{VI.4.4})$$

donde¹

$$\omega_{ij} = [(\epsilon_i - \epsilon_j)^2 - v_{ij}^2 (g_{ii}^0 - g_{jj}^0)^2]^{1/2}, \quad (\text{VI.4.5})$$

son las frecuencias propias de (VI.4.1) (frecuencias de RPA) respecto de (VI.4.3). Los elementos diagonales permanecen constantes ($\omega_{ii}=0$). Para v_{ij} fijo, la menor frecuencia es obtenida en el caso puro ($|g_{ii}^0 - g_{jj}^0| = 1$).

La solución (VI.4.3) puede emplearse si la matriz g inicial posee elementos no diagonales pequeños comparados con los diagonales. En este sentido, las frecuencias (VI.4.5) dependen de las condiciones iniciales, debiendo elegirse la matriz g^0 más próxima a g (por ej. $g_{ii}^0 = g_{ii}(0)$). La solución (VI.4.3) es estable si ω_{ij} es real para todo i, j , es decir,

$$\begin{aligned} |v_{ij}| &\leq |\epsilon_i - \epsilon_j| / |g_{ii}^0 - g_{jj}^0| \\ &\equiv v_{ij}^c. \end{aligned} \quad (\text{VI.4.6})$$

Cuanto mayor sea la entropía (menor valor de $|g_{ii} - g_{jj}|$) mayor

será el rango de aplicabilidad de (VI.4.3). La influencia de la interacción disminuye por consiguiente al aumentar la entropía. Si $|v_{ij}| > v_{ij}^c$, ω_{ij} se hace imaginaria, y (VI.4.3) se torna inestable. Puede ocurrir sin embargo, un tipo muy particular de estabilidad para condiciones iniciales.

$$\text{Re}(\delta g_{ij}(0)) = \{[(\varepsilon_i - \varepsilon_j) - v_{ij}(g_{jj} - g_{ii})]/\omega_{ij}\} \text{Im}(\delta g_{ij}(0)), \quad (\text{VI.4.7})$$

en cuyo caso la matriz densidad $g = g^0 + \delta g(0)$ posee la misma entropía y energía (linealizadas) que g^0 . De este modo,

$$\delta g_{ij}(t) \propto \exp\{-4|\omega_{ij}|t\}, \quad (\text{VI.4.8})$$

eliminándose las componentes exponencialmente crecientes. La solución demora en este caso un tiempo infinito para llegar al punto de equilibrio.

Las soluciones estacionarias de U(2) corresponden al caso en que existe un sólo elemento no diagonal no nulo. Para $i=j$, las ecuaciones (VI.4.2) se satisfacen si $g_{ik}^0 = \pm g_{ki}^0$, $\forall i \neq k$, (o sea g_{ki}^0 real o imaginario puro), cualquiera sea el valor de los v_{ij} . Por lo tanto, si el único elemento no diagonal no nulo es el g_{ij}^0 ($i \neq j$), los elementos diagonales deben satisfacer

$$(g_{ii}^0 - g_{jj}^0) = \pm (\varepsilon_i - \varepsilon_j)/v_{ij}, \quad (\text{VI.4.9})$$

siendo g_{kk}^0 ($i \neq k \neq j$) arbitrario. El signo + (-) corresponde a g_{ij}^0 real (imaginario). (VI.4.9) constituye la generalización de (VI.B.20) al caso estadístico. Notemos que la solución (VI.4.9) anula la frecuencia (VI.4.5). Esta solución aparece pues, cuando (VI.4.5) se torna inestable. La nueva frecuencia de oscilación

para los niveles acoplados es

$$\omega'_{ij} = |v_{ij}g_{ij}^0|/2^{1/2} \quad (VI.4.10)$$

Para vincular más estrechamente (VI.4.10) y (VI.4.5), ambas pueden reescribirse en términos de los Casimires de U(2),

$$\omega_{ij} = [(\epsilon_i - \epsilon_j)^2 - (2v_{ij}J_{ij})^2]^{1/2}, \quad v < v_{ij}^C \quad (VI.4.11)$$

$$\omega'_{ij} = \{2[-(\epsilon_i - \epsilon_j)^2 + (2v_{ij}J'_{ij})^2]\}^{1/2}, \quad v > v_{ij}^C$$

donde $J_{ij}^2 = \frac{1}{2}(g_{ii}^0 - g_{jj}^0)^2$, $J'_{ij}^2 = \frac{1}{2}(g_{ii}^0 - g_{jj}^0)^2 + (g_{ij}^0 g_{ji}^0)$. Tanto δg_{ij} como δg_{ii} y δg_{jj} oscilan con la frecuencia (VI.4.10). Las frecuencias correspondientes a los restantes elementos también se modifican. Por ej., en el caso $n=3$ y $v_{ij} = v(1-\delta_{ij})$, para $g_{12}^0 \neq 0$ δg_{23} y δg_{13} son combinaciones lineales de términos que oscilan con las frecuencias

$$\omega'_{\pm} = \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2} \{ (A_1 + A_2) \pm [(A_1 - A_2)^2 + 4B_1 B_2]^{1/2} \}^{1/2}, \quad (VI.4.12)$$

con

$$A_i = (\epsilon_s - \epsilon_i)^2 - v^2 (g_{ss}^0 - g_{ii}^0)^2, \quad (VI.4.13)$$

$$B_i = 2v |g_{21}^0| [(\epsilon_s - \epsilon_i) - v(g_{ss}^0 - g_{ii}^0)],$$

donde se ha supuesto que la primera inestabilidad ocurre para ω_{12} .

Al igual que en el caso puro, si el número de elementos no diagonales no nulos es ≥ 3 , existen diversos tipos de soluciones estacionarias, de acuerdo a las fases de los $g_{ij}^0 \neq 0$, $i \neq j$, los cuales deben ser reales o imaginarios puros. Por ej., en el caso $v_{ij} = v(1-\delta_{ij})$, si todos los elementos no diagonales no nulos poseen la misma fase, (VI.4.2) se satisface si

$$(g_{ii}^{\circ} - g_{jj}^{\circ}) = \pm (\varepsilon_i - \varepsilon_j) / \nu , \quad (\text{VI.4.9})$$

para todo par $i \neq j$ tal que $g_{ij}^{\circ} \neq 0$. Nuevamente, el signo $+$ $(-)$ corresponde a elementos g_{ij}° reales (imaginarios). Si $n=3$, en el caso real, las fórmulas (VI.B.16) siguen siendo válidas para los elementos diagonales, pero los g_{ij}° , $i \neq j$, son arbitrarios.

Además, nuevos tipos (o ramas) de soluciones estacionarias aparecen en el caso estadístico. Por ej., es posible elegir ahora $(g_{ij}^{\circ})^2 < 0 \ \forall \ i \neq j$, lo cual no es posible en el caso puro en virtud de (VI.B.4). Para $n=3$, este tipo de solución se agrega a las 'prolongaciones' estadísticas de las soluciones (VI.B.16) y (VI.B.22).

VI.5 INFERENCIA ESTADISTICA Y LA APROXIMACION RESTRINGIDA DE HFDI

Para resolver el sistema de ecuaciones (VI.3.1), es necesario en principio conocer los valores iniciales $g_{ij}^0 \quad \forall i, j$. En esta sección, consideraremos el caso en que la matriz densidad inicial es conocida sólo parcialmente. Por ej., supongamos una situación en $U(3)$ en la que g_{22} no es conocido a $t=0$. En tal caso, $\lambda_{22} = 0 = \lambda_{22}^*$, y utilizando (VI.A.14) se obtiene¹,

$$0 = \lambda_{22} = B[g_{22}(A - g_{11}) + g_{21}g_{12}] , \quad (\text{VI.5.1})$$

o sea,

$$g_{22} = g_{21}g_{12} / (g_{11} - A) . \quad (\text{VI.5.2})$$

La cantidad A depende de los autovalores de g , lo que transforma (VI.5.2) en una ecuación no lineal. El valor de g_{22} dado por (VI.5.2) depende de los restantes elementos de la matriz g (que se suponen conocidos), y con este valor se puede proceder a resolver el sistema (VI.3.1). El valor inicial ha sido así obtenido por inferencia estadística, y posee el significado de maximizar la entropía para valores dados de los restantes elementos. El valor inferido es siempre menor que el valor puro $g_{22}^p = g_{21}g_{12}/g_{11}$ (véase (VI.B.4)).

Se muestra en la fig. 1-a la variación de g_{22} con respecto a g_{21} , para distintos valores (fijos) de los restantes elementos. La variación de los elementos no diagonales está limitada por los valores puros (VI.B.4), o sea, $|g_{ij}| \leq [g_{ii}g_{jj}]^{1/2}$ (si superan este valor, la matriz densidad comienza a poseer autovalores negativos). Notemos que la variación de g_{22} con g_{12} o g_{21} es prácticamente lineal, excepto en los extremos, donde se observa un

marcado incremento.

En la fig. 2-b se muestra la variación con respecto a g_{11} . Suponiendo $g_{22} = g_{33}$, el valor de g_{11} está restringido por la condición (pura) $\frac{1}{2} g_{11}(1-g_{11}) \geq |g_{12}|^2$. Se observa una variación prácticamente nula para valores no muy pequeños de g_{11} y por el contrario, un rápido incremento del valor inferido al acercarse g_{11} a su valor mínimo.

Si además resulta desconocido 'a priori' otro elemento no diagonal, la inferencia estadística se torna trivial, reduciéndose el problema a $U(2)$. Por ej., si g_{31} es desconocido, la condición $\lambda_{31} = \lambda_{32} = 0$ implica a su vez, $g_{31} = g_{32} = 0$.

Otra posibilidad que surge en el tratamiento estadístico es, como hemos dicho, la de excluir de $\hat{\rho} \forall t$ ciertos operadores considerados irrelevantes, de los cuales se desconocen inicialmente sus valores de expectación. De este modo, es posible reducir el número de ecuaciones no lineales a ser resueltas, obteniéndose distintas aproximaciones autoconsistentes restringidas de HFDT. En el ejemplo considerado anteriormente, la exclusión de \hat{G}_{32} implica

$$\lambda_{32}(t) = \lambda_{23}(t) = 0, \quad (\text{VI.5.3})$$

es decir,

$$g_{32}(t) = \frac{g_{31}(t)g_{12}(t)}{g_{11}(t) - A(t)}. \quad (\text{VI.5.4})$$

La entropía restringida

$$S' = -N \left[\sum_{i=1}^s \lambda_{ii} g_{ii} + \sum_{j=2}^s (\lambda_{1j} g_{j1} + \lambda_{j1} g_{1j}) \right], \quad (\text{VI.5.5})$$

sigue siendo una constante de movimiento en la aproximación

restringida. No obstante, los Casimires γ_2 , γ_3 , y los autovalores de g adoptan un comportamiento oscilatorio, pero conservando $N = \sum_i G_i$, y S' . La energía media se conserva sólo si $V_{23} = 0$. Resulta claro que para V_{23} suficientemente grande, la aproximación restringida no proveerá buenos resultados, pues el rol de \hat{G}_{32} será importante en la dinámica del sistema. Sin embargo, para valores pequeños de V_{32} y de los elementos no diagonales, los resultados deben ser satisfactorios.

Conviene remarcar que en virtud de las fig. 1-a y 1-b, el valor inferido puede reemplazarse directamente por $C g_{31}(t)g_{12}(t)$, siendo C una constante de proporcionalidad, para valores no muy pequeños de g_{11} y no muy elevados de g_{31} y g_{12} , lo que simplifica la relación de inferencia estadística. Además, se obtiene en este caso, para un hamiltoniano no perturbado, la evolución temporal exacta, pues el valor inferido satisface entonces (VI.3.1) (para $V_{ij} = 0$). La trayectoria exacta (que coincide en este caso con HFDT) se aparta pues muy poco del tratamiento restringido.

La proyección de los resultados de HFDT (completo) sobre el conjunto reducido de observables, implica construir un operador estadístico con $\lambda_{23}(t) = 0$, pero que reproduzca los valores medios de HFDT para los observables relevantes. La entropía efectiva, construida con este operador, posee una expresión similar a (VI.5.5), pero evaluada en los valores de HFDT. La diferencia $S_{ef} - S(0) \geq 0$ provee una medida global de la exactitud de la aproximación restringida. Si la variación de S_{ef} es pequeña, la exclusión de \hat{G}_{32} del exponente no afecta mayormente la evolución temporal de los restantes operadores, significando que la información se mantiene aproximadamente confinada dentro del

conjunto restringido de observables, en cuyo caso puede decirse que posee un buen grado de colectividad. En caso contrario, la inclusión de \hat{G}_{92} resulta esencial.

Finalmente, mencionamos que si se excluye además \hat{G}_{91} del exponente de $\hat{\rho}$, las ecuaciones restringidas se reducen a las de HFDT para $U(2)$, pues la inferencia estadística resulta trivial, y el tercer nivel desaparece de la dinámica del problema. Para el hamiltoniano (VI.1.17), la aproximación restringida coincide con la de HFDT, pues en este caso g_{91} y g_{92} permanecen nulos para todo tiempo t (véase (VI.3.1)) si se anulan inicialmente.

VI.6 DISCUSION Y RESULTADOS

En las Fig. 2-4, se muestran resultados numéricos para la evolución temporal de distintos observables para el caso $n = 3$ ($U(3)$). En todos los ejemplos, hemos elegido $\varepsilon_1 = 0$, $\varepsilon_2 = 1$ (sin pérdida de generalidad) y $\varepsilon_3 = 2$. El tiempo se mide en unidades de $\hbar/(2\pi\varepsilon)$, con $\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$. Por ej., para $\varepsilon = 0.5$ Mev, la unidad es de 1.3×10^{-21} seg., es decir, 13 veces el tiempo de recorrido transversal de un nucleón, 10^{-22} seg.

Los resultados de la fig. 2 corresponden al caso $v_{ij} = v(1 - \delta_{ij})$, con $v = 1.0$. Los valores iniciales de los elementos de g son $g_{11}^0 = 0.6$, $g_{22}^0 = g_{33}^0 = 0.2$, $g_{21}^0 = g_{31}^0 = 0.1$ (reales). El valor de g_{32} es 'a priori' desconocido. La inferencia estadística (VI.5.1) proporciona el valor $g_{32} = 0.01148$ y una entropía intensiva $S/N = 0.8944 = 0.814 s_{\max}$, donde $s_{\max} = \ln(3) = 1.0896$ (VI.1.15).

La evolución temporal de g_{21} y g_{31} es aproximadamente sinusoidal, debido a la proximidad de las condiciones iniciales con la solución estacionaria (VI.4.3). Las frecuencias de oscilación aproximadas se encuentran dadas por (VI.4.5). Por el contrario, el comportamiento de $g_{ii}(t)$ es puramente no lineal, pues $\omega_{ii} = 0$, y las ecuaciones linealizadas predicen una evolución constante de g_{ii} .

Se puede apreciar en este caso que el acuerdo entre HFDT y la evolución exacta (que involucra para $N=8$ trazas sobre 6561 estados accesibles, exigiendo la diagonalización de $\hat{\rho}$ y \hat{H} en las distintas representaciones irreducibles intervinientes) es mejor para los elementos no diagonales que para los diagonales, debido

precisamente al comportamiento altamente no lineal de estos últimos. Si predominan los efectos lineales (ω_{ij} grande), el acuerdo es bueno, al menos para tiempos cortos. De todos modos, para tiempos grandes, los valores de HFDT quedan fuera de fase, y no reproducen el carácter amortiguado de la solución exacta, el cual se debe a un neto efecto de dispersión de información sobre correlaciones.

La aproximación de HFDT mejora al aumentar el número de partículas, y proporciona como hemos mencionado, la evolución exacta de magnitudes intensivas en el límite $N \rightarrow \infty$. Además, cabe destacar que HFDT da buenos resultados para los períodos de oscilación.

La entropía de p.i. construida con los resultados exactos es mostrada en la fig. 2-d, y exhibe inicialmente fuertes oscilaciones, especialmente para N pequeño, indicando un flujo de información en ambos sentidos entre los grados de libertad de p.i. y las correlaciones. La pérdida de información no crece pues monótonamente al aumentar t . El primer mínimo profundo de S corresponde a los puntos de cruce, es decir, aquellos donde los resultados exactos coinciden aproximadamente con los de HFDT. Además, los mínimos suaves de S aparecen donde sólo algunos de los valores medios relevantes coinciden. Notemos además que si bien la tendencia inicial de S es la de aumentar en promedio, S se estabiliza para tiempos grandes, desarrollando oscilaciones estables de poca amplitud.

El acuerdo entre las versiones completa y restringida (excluyendo g_{32} del operador estadístico) de HFDT es extremadamente bueno en este caso. Los resultados de HFDT

restringido son indistinguibles en la escala de la figura de los del tratamiento completo. La magnitud $A(t)$ en (VI.5.4) permanece prácticamente constante, simplificando el proceso de inferencia estadística.

La proyección de los valores medios de HFDT sobre el conjunto restringido, da como resultado una entropía efectiva que se mantiene siempre menor que 0.895 para el intervalo de tiempo de la figura. Sin embargo, si se la examina en detalle, exhibe una evolución bastante compleja, con un comportamiento menos disipativo que el correspondiente a la fig. 2-d.

En la fig. 3 se muestra otro caso, con un valor mayor de la constante de acoplamiento ($v = 2.0$) y de los elementos no diagonales ($g_{21}^0 = g_{31}^0 = 0.2$), permaneciendo igual los elementos diagonales. El valor inicial inferido es ahora $g_{32}^0 = 0.0490$, y $S/N = 0.7149 = 0.651 s_{\max}$. Aparecen en este caso anarmonicidades en la evolución de g_{21} , dado que las condiciones iniciales se apartan ahora considerablemente del equilibrio. Este es el elemento más afectado, pues es el que posee la menor frecuencia. La evolución de g_{31} es todavía oscilatoria. No obstante, las frecuencias de oscilación son algo mayores de las que corresponderían según RPA (VI.4.5).

Aparece ahora una diferencia de fase en la evolución de g_{31} y g_{11} entre los tratamientos de HFDT completo y restringido. Dado que los elementos no diagonales, y la constante de acoplamiento v son mayores en este caso, el rol de g_{32} en el hamiltoniano y en la dinámica del sistema es más importante. Sin embargo, la aproximación restringida es sensible a las anarmonicidades en el comportamiento de g_{21} y al comportamiento no lineal de g_{11} ,

reproduciendo todos los extremos.

En la fig. 3-d, se muestra la evolución de la entropía efectiva S' (VI.5.5), utilizando resultados de HFDT completo. La evolución presenta un comportamiento oscilatorio más acentuado que el mostrado en 1d, indicando obviamente que la colectividad del conjunto restringido de observables relevantes es menor que la del conjunto completo. Nuevamente, puede apreciarse la semejanza con la evolución de los valores medios, correspondiendo los mínimos a los puntos de cruce.

En la fig. 4 se muestra la evolución de $\text{Re}(g_{92})$ en detalle para los dos casos considerados, de acuerdo a resultados exactos y HFDT completo y restringido. Si bien la amplitud de la variación global es pequeña, la evolución es compleja y aparecen diferencias entre los tratamientos completo y restringido. No obstante, este último reproduce todos los extremos de la evolución de HFDT, encontrándose incluso más cerca de los resultados exactos en algunos intervalos. La evolución de HFDT se encuentra pues muy próxima a la aproximación autoconsistente restringida. La razón del apartamiento de $g_{92}(t)$ del comportamiento oscilatorio radica en que $|g_{92}|$ es un orden más pequeño que $|g_{21}|$ y $|g_{91}|$, y por consiguiente, g_{21}^2 es comparable a g_{91} . La linealización exige que los desplazamientos δg_{ij} sean todos pequeños y además, de igual orden.

APENDICE A

MULTIPLICADORES DE LAGRANGE Y VALORES DE EXPECTACION EN EL MODELO

U(n) RESTRINGIDO

Para hallar la relación entre los multiplicadores de Lagrange y los correspondientes valores medios, podemos seguir los lineamientos del Cap. II. Mediante una transformación de la forma

$$c'_{pi} = \sum_j U_{ij} c_{pj}, \quad (\text{VI.A.1})$$

podemos llevar el operador (VI.1.5) a la forma diagonal,

$$\hat{\rho} = \exp\{\lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i \hat{G}_{ii}'\}, \quad (\text{VI.A.2})$$

donde λ_i denota los autovalores de Λ , y

$$\hat{G}_{ij}' = \sum_p c_{pi}'^+ c_{pj}' = \sum_{k,l} U_{ik}^* U_{jl} \hat{G}_{kl}. \quad (\text{VI.A.3})$$

Consideremos las trazas tomadas en el subespacio de dimensión n^N .

La normalización $\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$ implica

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= -N \ln\left\{ \sum_{i=1}^n \exp(\lambda_i) \right\} \\ &= -N \ln\{\text{tr}[\exp(\Lambda')]\}, \end{aligned} \quad (\text{VI.A.4})$$

donde $\Lambda'_{ij} = \lambda_i \delta_{ij} = U \Lambda U^+$. De este modo, se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \hat{G}_{ij}' \rangle &= -\delta_{ij} \frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_i} \\ &= \delta_{ij} N \exp(\lambda_i) / \sum_i \exp(\lambda_i), \end{aligned} \quad (\text{VI.A.5})$$

lo que puede resumirse en

$$G' = \exp(\Lambda') / \text{tr}[\exp(\Lambda')] , \quad (\text{VI.A.6})$$

donde $G'_{ij} = \langle \hat{G}'_{ji} \rangle$. Dado que $G = U^\dagger G' U$, $\Lambda = U^\dagger \Lambda' U$, en una base general se obtiene¹,

$$G = N \exp(\Lambda) / \text{tr}[\exp(\Lambda)] . \quad (\text{VI.A.7})$$

Si $\text{tr}[\exp(\Lambda)] = 1$, entonces $\lambda_0 = 0$, y se obtiene la relación (VI.1.8).

Para $n = 3$, el desarrollo explícito de (VI.A.7) conduce a (i, j, k , denotan tres índices diferentes)

$$\begin{aligned} G_{ji} &= -\sum_l \frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_l} \frac{\partial \lambda_l}{\partial \lambda_{ij}} \\ &= (\lambda_{ji}(A - \lambda_{kk}) + \lambda_{jk}\lambda_{ki})B , \end{aligned} \quad (\text{VI.A.8})$$

$$\begin{aligned} G_{ji} &= -\sum_l \frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_l} \frac{\partial \lambda_l}{\partial \lambda_{ij}} \\ &= (\lambda_{ii}A + \lambda_{jj}\lambda_{kk} - \lambda_{jk}\lambda_{kj})B + C , \end{aligned} \quad (\text{VI.A.9})$$

donde A, B, C son magnitudes que dependen sólo de los autovalores λ_i . Introduciendo

$$\begin{aligned} P(\lambda_i) &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \prod_l (\lambda_i - \lambda_l) \Big|_{\lambda=\lambda_i} \\ &= (\lambda_i - \lambda_j)(\lambda_i - \lambda_k) , \end{aligned} \quad (\text{VI.A.10})$$

$$Z_i = \exp(\lambda_i) / \sum_i \exp(\lambda_i) , \quad (\text{VI.A.11})$$

se obtiene,

$$\begin{aligned}
B &= \sum_i Z_i / P(\lambda_i) , \\
A &= \{ \sum_i \lambda_i Z_i / P(\lambda_i) \} / B , \\
C &= \sum_i Z_i (\lambda_i^2 - \lambda_i \text{tr}[\Lambda]) / P(\lambda_i) .
\end{aligned}
\tag{VI.A.12}$$

Las relaciones (VI.A.8-9) se obtienen inmediatamente a partir de la ecuación de autovalores

$$\begin{aligned}
0 &= \prod_j (\lambda - \lambda_j) \\
&= \lambda_i^3 - \lambda_i^2 \text{tr}[\Lambda] + \frac{1}{2} \lambda_i \{ (\text{tr}[\Lambda])^2 - \text{tr}[\Lambda^2] \} \\
&\quad - \frac{1}{6} \{ (\text{tr}[\Lambda])^3 + 2\text{tr}[\Lambda^3] - 3\text{tr}[\Lambda]\text{tr}[\Lambda^2] \} .
\end{aligned}
\tag{VI.A.13}$$

Para la relación inversa $\Lambda = \ln(g)$ se obtiene análogamente,

$$\lambda_{ji} = \{ g_{ji} (A' - g_{kk}) + g_{jk} g_{ki} \} B' , \tag{VI.A.14}$$

$$\lambda_{ii} = \{ g_{ii} A' + g_{jj} g_{kk} - g_{jk} g_{kj} \} B' + C' , \tag{VI.A.15}$$

donde A' , B' , C' poseen las mismas expresiones (VI.A.12) pero con el reemplazo $Z_i \rightarrow Z'_i = \ln(g_i)$, $\lambda_i \rightarrow g_i$.

Para valores medios tomados en un conjunto gran canónico, sólo se altera la relación entre los autovalores λ_i y g_i . Las relaciones (VI.A.8-9) (VI.A.14-15) siguen entonces siendo válidas con el reemplazo $Z_i = [1 + \exp(\lambda_i)]^{-1}$, $Z'_i = \ln[g_i^{-1} - 1]$.

Para $n = 2$, las fórmulas anteriores se reducen a

$$\begin{aligned}
G_{21} &= \alpha \lambda_{12} , \\
G_{11} - G_{22} &= \alpha (\lambda_{11} - \lambda_{22}) , \\
\alpha &= [\exp(\lambda_1) - \exp(\lambda_2)] / \{ [\exp(\lambda_1) + \exp(\lambda_2)] [\lambda_1 - \lambda_2] \} ,
\end{aligned}
\tag{VI.A.16}$$

las cuales son equivalentes a las (III.3.11). No es posible apreciar en $U(2)$ efectos no triviales de inferencia estadística, pues los valores medios son directamente proporcionales a los correspondientes multiplicadores.

Notemos que dentro del espacio restringido, el operador (VI.1.5) puede escribirse como el producto de \underline{N} factores independientes

$$\hat{\rho} = \prod_{p=1}^N \exp\left\{ \sum_{i=1}^n \lambda_{ij} c_{pi}^+ c_{pj} \right\}, \quad (\text{VI.A.17})$$

de modo que la validez del teorema de Wick para el cálculo de valores medios respecto de (VI.A.17) queda restringida a productos de operadores elementales con distinto índice p . Así, para un operador de dos cuerpos se obtiene,

$$\langle c_{pi}^+ c_{qj}^+ c_{qk} c_{pl} \rangle = (1 - \delta_{pq}) (\delta_{kj} \delta_{il} g_i g_j), \quad (\text{VI.A.18})$$

con g_i dado por la expresión (VI.1.9), mientras que para valores medios en un conjunto gran canónico,

$$\langle c_{pi}^+ c_{qj}^+ c_{qk} c_{pl} \rangle = \delta_{kj} \delta_{il} f_i f_j - \delta_{pq} \delta_{ik} \delta_{jl} f_i f_j, \quad (\text{VI.A.19})$$

donde ahora f_i esta dado por la expresión de Fermi Dirac (II.1.14). Al utilizar (VI.A.18), los valores medios de operadores tales como \hat{G}_{ii}^2 , $\hat{G}_{ii} \hat{G}_{ij}$ se modifican. Se obtiene, por ej., una fluctuación nula del número de partículas. No obstante, el valor medio de \hat{G}_{ij}^2 , $i \neq j$, posee la misma expresión en ambos conjuntos.

APENDICE B

SOLUCIONES DE HARTREE FOCK A $T = 0$

En el modelo descrito en la sección (VI.1), cualquier D.S. perteneciente a la representación irreducible completamente simétrica, puede expresarse, utilizando el teorema de Thouless (II.A.14), en la forma³

$$|\psi(\vec{x})\rangle = x_1^N \exp\left(\sum_{i=2}^n h_i \hat{G}_{i1}\right) |\psi(0)\rangle \quad (\text{VI.B.1a})$$

$$= \sum_{n_1, \dots, n_n} \left\{ (N! / \prod_{i=1}^n n_i!)^{1/2} \prod_{i=1}^n (x_i)^{n_i} |n_1, \dots, n_n\rangle \right\}, \quad (\text{VI.B.1b})$$

donde $|\psi(0)\rangle = \prod_{p=1}^N c_{p_1}^+ |0\rangle$ es el estado fundamental no perturbado y

$h_i = x_i/x_1$. La suma sobre los n_i está restringida por la condición $\sum_{i=1}^n n_i = N$. La normalización $\langle\psi(\vec{x})|\psi(\vec{x})\rangle = 1$ exige

$$\sum_{i=1}^n |x_i|^2 = 1. \quad (\text{VI.B.2})$$

Dado que el exponente en (VI.B.1a) conmuta con los operadores de Casimir de $U(n)$, $|\psi(\vec{x})\rangle$ pertenece a la misma representación irreducible a la que pertenece $|\psi(0)\rangle$, y es idéntico al estado coherente obtenido al aplicar una transformación de $SU(n)$ al estado $|\psi(0)\rangle$. Las expresiones (VI.B.1) generalizan las fórmulas (III.B.2) para $n > 2$. Los estados $|\psi(\vec{x})\rangle$ son por lo tanto no ortogonales y sobrecompletos,

$$\langle\psi(\vec{x}')|\psi(\vec{x})\rangle = \left(\sum_{i=1}^n x_i'^* x_i\right)^N. \quad (\text{VI.B.3})$$

Utilizando (VI.B.1) pueden calcularse los elementos de la matriz densidad de un cuerpo³⁻⁴

$$\begin{aligned}\langle \psi(\vec{x}) | c_{qj}^+ c_{pi} | \psi(\vec{x}) \rangle &= \delta_{pq} x_i x_j^* \\ &= g_{ij} \delta_{pq}\end{aligned}\quad (\text{VI.B.4})$$

La cantidad $|x_i|^2$ representa pues la fracción del número total de partículas ocupando el nivel i . Utilizando el teorema de Wick podemos calcular fácilmente el valor medio del hamiltoniano (VI.1.17), respecto de un estado (VI.B.1):

$$\begin{aligned}\langle \psi(\vec{x}) | \hat{H} | \psi(\vec{x}) \rangle &= N \left\{ \sum_{i=1}^n \epsilon_i |x_i|^2 + \frac{1}{2} \sum_{i < j} v_{ij} [x_i^2 (x_j^2)^* + x_j^2 (x_i^2)^*] \right\} \\ &= N \left\{ \sum_{i=1}^n \epsilon_i |x_i|^2 + \sum_{i < j} v_{ij} |x_i|^2 |x_j|^2 \cos[2(\phi_i - \phi_j)] \right\}, \\ &\equiv E_{\text{HF}},\end{aligned}\quad (\text{VI.B.5})$$

donde

$$v_{ij} = v_{ij}^{(N-1)} \quad (\text{real}), \quad (\text{VI.B.6})$$

y $x_i = |x_i| e^{i\phi}$. La fase de uno de los x_i es arbitraria (véase (VI.B.1)). El valor medio intensivo E_{HF}/N es independiente de N al escribirlo en términos de las constantes v_{ij} , por lo que las soluciones de HF son independientes de N para v_{ij} fijo.

Estudiaremos en primer lugar el caso general en n niveles con

$$v_{ij} = -v(1 - \delta_{ij}), \quad v > 0. \quad (\text{VI.B.7})$$

Las soluciones de HF se obtienen al hacer estacionaria la expresión (VI.B.5) respecto de los x_i . No obstante, no todas las

soluciones corresponden a mínimos de E_{HF} . Concentraremos primero la atención en las soluciones de energía más baja³ con el objeto de poseer una idea aproximada del comportamiento del estado fundamental. Para el caso (VI.B.7) la mínima energía se obtiene para elementos g_{ij} reales ($\cos[2(\phi_i - \phi_j)] = 1$) por lo que supondremos en lo siguiente x_i real. Incorporando la restricción (VI.B.2) por medio de un multiplicador de Lagrange λ , la cantidad a minimizar es

$$E_{HF}/N - \lambda = \sum_{i=1}^n \epsilon'_i x_i^2 - v \sum_{i < j} x_i^2 x_j^2, \quad (VI.B.8)$$

donde $\epsilon'_i = \epsilon_i - \lambda$ y $0 \leq x_i^2 \leq 1$. La minimización de (VI.B.8) conduce a

$$\lambda = \{S - v(n-1)\}/n, \quad (VI.B.9)$$

$$x_i^2 = \{1 + (S - n\epsilon_i)/v\}/n, \quad (VI.B.10)$$

donde $S = \sum_{i=1}^n \epsilon_i$. La restricción $0 \leq x_i^2 \leq 1$ implica, para todo nivel i , las condiciones

$$v > (S - n\epsilon_i)/(n-1), \quad (VI.B.11a)$$

$$v > n\epsilon_i - S, \quad (VI.B.11b)$$

siendo la más fuerte

$$v > n\epsilon_n - S \equiv v_c^n. \quad (VI.B.12)$$

Para v mayor que el valor crítico v_c^n , cada nivel es ocupado con una 'probabilidad' x_i^2 . Si $v < v_c^n$, x_n se anula, y la solución

más baja es la del sistema de $n-1$ niveles. Del mismo modo, es fácil ver que el sistema posee $(n-1)$ transiciones de fase en los valores críticos⁹

$$v_c^i = i\varepsilon_i - \sum_{j=1}^i \varepsilon_j, \quad i=2, \dots, n. \quad (\text{VI.B.13})$$

Para $v < v_c^i$, el nivel i y los situados por encima de él se encuentran vacíos, comenzando a ser ocupado el nivel i en $v = v_c^i$. La energía de HF en el 'modo' $U(n)$ (n niveles ocupados) es

$$E_{\text{HF}}^n/N = -\frac{1}{2} \{v(n-1)/n + \sum_{i=1}^n (\varepsilon_i - S/n)^2/v\} + S/n. \quad (\text{VI.B.14})$$

Las transiciones de fase mencionadas son de 2° orden, siendo constantes tanto E_{HF} como dE_{HF}/dv en $v = v_c^i$. Las soluciones son altamente degeneradas, pues E_{HF} es independiente del signo de x_i . Por consiguiente, existen 2^{n-1} soluciones diferentes que proporcionan la energía (VI.B.14). En el límite termodinámico HF proporciona la energía intensiva exacta, por lo que (VI.B.14) coincide con el resultado exacto para $N \rightarrow \infty$. La demostración es similar a la del Cap. III, y se basa en la generalización de la desigualdad (III.B.10) al caso $U(n)$.

Para $n = 3$, se puede suponer sin pérdida de generalidad $\varepsilon_1 = 0$, $\varepsilon_2 = 1$, $\varepsilon_3 = \varepsilon$, en cuyo caso las transiciones ocurren en $v_1 = 1$, y $v_2 = 2\varepsilon - 1$. Si $v < v_1$ la solución es el estado fundamental no perturbado. Para $v_1 \leq v \leq v_2$, se obtienen las soluciones de $U(2)$

$$\begin{aligned}
 x_1^2 &= \frac{1}{2} (1+1/v) , \\
 x_2^2 &= \frac{1}{2} (1-1/v) .
 \end{aligned}
 \tag{VI.B.15}$$

Finalmente, si $v > v_2$ se obtiene la solución de U(3),

$$\begin{aligned}
 x_1^2 &= \frac{1}{3} \{1 + (\varepsilon+1)/v\} , \\
 x_2^2 &= \frac{1}{3} \{1 + (\varepsilon-2)/v\} , \\
 x_3^2 &= \frac{1}{3} \{1 - (2\varepsilon-1)/v\} .
 \end{aligned}
 \tag{VI.B.16}$$

Las correspondientes energías son

$$E_{\text{HF}}/N = \begin{cases} 0 , & v \leq 1 \\ -\frac{1}{2} [v/2 + 1/(2v)] , & 1 \leq v \leq 2\varepsilon-1 \\ -\frac{1}{2} [v + (\varepsilon^2-\varepsilon+1)/v] + \frac{1}{3}(1+\varepsilon) , & v \geq 2\varepsilon-1 . \end{cases}
 \tag{VI.B.17}$$

Si la interacción entre los niveles más distantes es menor, la transición a la solución completa de U(3) se retarda. Por ej. en el caso $v_{12} = v_{23} = v$, $v_{13} = \alpha v$, $0 \leq \alpha \leq 1$, se obtiene⁴

$$\begin{aligned}
 x_1^2 &= [\varepsilon(2/\alpha-1) + v+1]/r , \\
 x_2^2 &= [\varepsilon-2 + v(2-\alpha)]/r , \\
 x_3^2 &= [-2\varepsilon/\alpha + v+1]/r ,
 \end{aligned}
 \tag{VI.B.18}$$

donde $r = v(4-\alpha)$, siendo el nuevo valor crítico $v_2 = 2\varepsilon/\alpha - 1$. Para $1 \leq v \leq v_2$, la solución más baja corresponde a (VI.B.15).

Además de las soluciones consideradas hasta ahora, HF exhibe

otras soluciones estacionarias, que corresponden tanto a extremos como puntos de ensilladura. Notemos que (VI.B.5) es estacionario en las fases si $\sin\{2(\phi_i - \phi_j)\} = 0$, lo que implica, para x_i real, x_j real o imaginario puro. Por ej., para $n = 3$, las soluciones pueden ser clasificadas en tres grupos:

a) soluciones de $U(1)$: corresponden a las tres soluciones con un nivel completamente ocupado:

$$|x_i| = 1, |x_j| = 0, j \neq i. \quad (\text{VI.B.19})$$

b) soluciones de $U(2)$: corresponden al caso de dos niveles ocupados. Las soluciones son de la forma

$$\begin{aligned} |x_i|^2 &= \frac{1}{2}(1 \pm (\epsilon_i - \epsilon_j)/v_{ij}), \\ |x_j|^2 &= \frac{1}{2}(1 \mp (\epsilon_i - \epsilon_j)/v_{ij}), \end{aligned} \quad (\text{VI.B.20})$$

con energías

$$E_{\text{HF}}/N = \pm \frac{1}{4}(v_{ij} + (\epsilon_i - \epsilon_j)^2/v_{ij}), \quad (\text{VI.B.21})$$

donde i, j ($i \neq j$) son los niveles ocupados, y $x_k = 0$ si $i \neq k \neq j$. El signo superior (inferior) corresponde a g_{ij} real (imaginario). Este tipo de soluciones puede existir solamente si $|v_{ij}| > |\epsilon_i - \epsilon_j|$. Por consiguiente, existen en total seis soluciones diferentes de $U(2)$, dos por cada elección de niveles, siendo cada una doblemente degenerada. Notemos que la energía más baja del sistema de dos niveles es independiente del signo de v .

c) Soluciones de $U(3)$: Existen muchas soluciones posibles, de acuerdo a las fases relativas de los x_i . En particular, si las constantes de acoplamiento son de la forma (VI.B.7), además de la

solución real (VI.B.16), existen soluciones con un elemento, por ej. el q_{ij} ($i \neq j$), real y los restantes imaginarios, en cuyo caso,

$$\begin{aligned} |x_i|^2 &= \frac{1}{5} \{1 - (3\varepsilon_j - 2\varepsilon_i - \varepsilon_k)/v\} , \\ |x_j|^2 &= \frac{1}{5} \{1 - (3\varepsilon_i - 2\varepsilon_j - \varepsilon_k)/v\} , \\ |x_k|^2 &= \frac{1}{5} \{3 + (\varepsilon_i + \varepsilon_j - 2\varepsilon_k)/v\} . \end{aligned} \quad (\text{VI.B.22})$$

De la restricción $0 \leq |x_i|^2 \leq 1$, $\forall i$, se deriva el valor crítico v_c para que la solución (VI.B.22) sea factible.

Existen en total tres soluciones diferentes de este tipo, de acuerdo a la elección del elemento real, cada una con degeneración 4 asociada a la indeterminación del signo de los x_i .

APENDICE C

REPRESENTACIONES IRREDUCIBLES Y ELEMENTOS DE MATRIZ EN $U(n)$

Las representaciones irreducibles de $U(n)$ pueden ser caracterizadas por los números cuánticos de partición⁶⁻⁷ $r_1 \geq r_2 \geq \dots \geq r_n$, $r_i \in \mathbb{N}$, en la forma (r_1, \dots, r_n) , lo cual representa un diagrama de Young. La dimensión del correspondiente multiplete es⁶

$$D(r_1, \dots, r_n) = \prod_{1 \leq i < j \leq n} (r_i - i - r_j + j) / (j - i) \quad (\text{VI.C.1})$$

En la representación del grupo dada por el modelo del presente capítulo, los n^N estados accesibles del sistema pueden ser caracterizados por $r = (r_1, \dots, r_n)$, $L = (n_1, \dots, n_n, m)$ y α (ver sección VI.3), mediante la descomposición de $(1, 0, \dots, 0)^N$ en sus representaciones irreducibles. Por consiguiente, $\sum_{i=1}^n r_i = N$ en las representaciones intervinientes.

Consideremos con más detalle el caso particular de $U(3)$. La expresión (VI.C.1) se reduce en este caso a

$$D(r_1, r_2, r_3) = (r_1 - r_2)(r_1 - r_3 + 2)(r_2 - r_3 + 1) / 2 \quad (\text{VI.C.2})$$

Se dan a continuación las representaciones intervinientes para $N = 2, 4$, y 8 , utilizadas en los ejemplos numéricos. Las multiplicidades $M(r)$ de la correspondiente representación están dadas por los coeficientes en las siguientes expansiones:

$$(1, 0, 0)^2 = (2, 0, 0) + (1, 1, 0) \quad ,$$

$$(1, 0, 0)^4 = (4, 0, 0) + 3(3, 1, 0) + 2(2, 2, 0) + 3(2, 1, 1) \quad ,$$

$$\begin{aligned}
 (1,0,0)^8 = & (8,0,0) + 7(7,1,0) + 20(6,2,0) + 28(5,3,0) + 14(4,4,0) \\
 & + 21(6,1,1) + 64(5,2,1) + 70(4,3,1) + 56(4,2,2) \\
 & + 42(3,3,2) .
 \end{aligned}
 \tag{VI.C.3}$$

Las expansiones (VI.C.3) se obtienen al acomodar los (N)diagramas 'elementales' (1,0,0) en todas las formas posibles. El primer término en los desarrollos anteriores es la representación irreducible completamente simétrica (N,0,...,0), la cual no posee degeneración.

Dado que los operadores (VI.1.1) permanecen invariantes frente a las N! permutaciones del índice p, las representaciones irreducibles de U(n) pueden ser caracterizadas de la misma manera que las del grupo de permutaciones de N elementos S_N . De este modo, la aplicación de \hat{G}_{ij} a un estado del multiplete modifica sólo el índice L, mientras que la aplicación de una permutación modifica el índice α , permaneciendo r invariante en ambos casos.

En la representación completamente simétrica, los estados del multiplete pueden generarse directamente en la forma

$$|n_1, \dots, n_n\rangle = \left[\frac{n_1!}{N! n_1! \dots n_n!} \right]^{1/2} (\hat{G}_{n_1})^{n_1} \dots (\hat{G}_{n_n})^{n_n} |N, 0, \dots, 0\rangle ,$$

(VI.C.4)

con

$$|N, 0, \dots, 0\rangle = \prod_p c_{p_1}^+ |0\rangle ,$$

(VI.C.5)

$$\langle n_1, \dots, n_n | n'_1, \dots, n'_n \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \dots \delta_{n_n n'_n}$$

(VI.C.6)

y $\sum_{i=1}^n n_i = N$. Esta representación es la única usualmente estudiada, ya que el estado fundamental de hamiltonianos del tipo (VI.1.17) pertenece a esta representación ((VI.C.5) es el estado fundamental

no perturbado). El cálculo de elementos de matriz en esta representación se simplifica considerablemente pues el índice m en L no es necesario. A partir de la definición (VI.C.4) se obtiene,

$$\hat{G}_{ii} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_n\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_n\rangle, \quad (\text{VI.C.7})$$

$$\hat{G}_{ij} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_n\rangle = [n_j (n_i + 1)]^{1/2} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_j - 1, \dots, n_n\rangle. \quad (\text{VI.C.8})$$

Dado que uno de los índices n_i es redundante, en $U(3)$ se utiliza frecuentemente la notación⁵

$$|p, q\rangle = \left[\frac{(N-p-q)!}{N!p!q!} \right]^{1/2} (\hat{G}_{21})^p (\hat{G}_{31})^q |0, 0\rangle, \quad (\text{VI.C.9})$$

donde $p = n_2$, $q = n_3$, y $0 \leq n_2 + n_3 \leq N$.

En otras representaciones irreducibles, la generación de una base ortonormal es más compleja. Pueden utilizarse diversos procedimientos, muchos de ellos basados en el aprovechamiento de distintos subgrupos. No obstante, emplearemos aquí un método recursivo.

Resulta claro que representaciones correspondientes a diagramas de Young que difieren solamente en el número de columnas totalmente llenas, son completamente similares, siendo distinto únicamente el valor de $N = \sum_{i=1}^n G_{ii}$. Tanto la dimensión (VI.C.1) como los elementos de matriz de \hat{G}_{ij} , $i \neq j$, dependen únicamente de $r_k - r_n$, ($k=1, \dots, n-1$). Por consiguiente supondremos $r_n = 0$. El grupo $SU(n)$ se deriva de $U(n)$ al extraer precisamente el operador $\hat{N} = \sum_{i=1}^n \hat{G}_{ii}$, y sus representaciones irreducibles son entonces las mismas que las de $U(n)$ con $r_n = 0$. De aquí en más, nos

concentraremos en el caso $n = 3$. Los estados

$$|p, q, s\rangle = (\hat{G}_{22})^s (\hat{G}_{31})^q (\hat{G}_{21})^p |0\rangle$$

$$\equiv |n_2, n_3, s\rangle, \quad (\text{VI.C.10})$$

con

$$n_2 = p-s+r_2, \quad n_3 = q+s,$$

$$|0\rangle = |n_2=r_2, n_3=0, 0\rangle \quad (\text{VI.C.11})$$

y $0 \leq p \leq r_1-r_2$, $0 \leq q \leq r_1-r_2-p$, $0 \leq s \leq r_2$, $n_1 = r_1-p-q$, forman en general una base no ortonormal del multiplete. $|0\rangle$ es el estado más 'bajo' del multiplete (el que proporciona la menor energía no perturbada) para el cual $\hat{G}_{ij} |0\rangle = 0$ si $i < j$. El número total de partículas presentes es $N = r_2+r_1$. La cantidad de estados con un mismo valor de n_2 y n_3 está dada por

$$K(n_2, n_3) = \text{Min}(r_1-r_2, r_2, n_1, n_2, n_3, r_1-n_1, r_1-n_2, r_1-n_3), \quad (\text{VI.C.12})$$

y por lo tanto, los índices n_2, n_3, s , pueden ser restringidos a los valores

$$0 \leq n_i \leq r_i, \quad i=1,2,3,$$

$$r_2 \leq n_2+n_3 \leq r_1+r_2, \quad (\text{VI.C.13})$$

$$M(n_2) \leq s \leq M(n_2) + K(n_2, n_3) - 1$$

donde $M(n_2) = \text{Max}(0, r_2-n_2)$.

El cálculo de $\langle n'_2 n'_3 s' | n_2 n_3 s \rangle = \delta_{n'_2 n_2} \delta_{n'_3 n_3} \delta_{s s'}$ puede obtenerse a mediante las fórmulas (que se deducen inmediatamente a partir de (VI.C.10))

$$\langle p, 0, 0 | p, 0, 0 \rangle = p(r_1 - r_2 - p + 1) \langle p-1, 0, 0 | p-1, 0, 0 \rangle, \quad (\text{VI.C.14})$$

$$\langle p, q, 0 | p, q, 0 \rangle = q(r_1 - p - q + 1) \langle p, q-1, 0 | p, q-1, 0 \rangle,$$

$$\begin{aligned} \langle n_2, n_3, s' | n_2, n_3, s \rangle &= s(n_2 - n_3 + s + 1) \langle n_2 + 1, n_3 - 1, s-1 | n_2 + 1, n_3 - 1, s'-1 \rangle \\ &+ \langle n_2 + 1, n_3 - 1, s'-1 | n_2 + 1, n_3 - 1, s \rangle (n_3 - s). \end{aligned} \quad (\text{VI.C.15})$$

La base ortonormal puede entonces construirse como

$$|n_2, n_3, t\rangle = \sum_s C_{n_2, n_3}^{st} / (\lambda_{n_2, n_3}^t)^{1/2} |n_2, n_3, s\rangle, \quad (\text{VI.C.16})$$

con $\langle n_2, n_3, t' | n_2, n_3, t \rangle = \delta_{tt'}$, donde

$$\sum_{s'} O_{n_2, n_3}^{ss'} C_{n_2, n_3}^{s't} = \lambda_{n_2, n_3}^t C_{n_2, n_3}^{st}, \quad (\text{VI.C.17})$$

λ_{n_2, n_3}^t denota los autovalores del overlap, y C_{n_2, n_3}^{st} las componentes de la autofunción correspondiente. A partir de la definición (VI.C.10) se obtienen las relaciones

$$\begin{aligned} \hat{G}_{31} |n_2, n_3, s\rangle &= |n_2, n_3 + 1, s\rangle, \\ \hat{G}_{32} |n_2, n_3, s\rangle &= |n_2 - 1, n_3 + 1, s + 1\rangle, \\ \hat{G}_{21} |n_2, n_3, s\rangle &= |n_2 + 1, n_3, s\rangle - s |n_2 + 1, n_3, s-1\rangle, \end{aligned} \quad (\text{VI.C.18})$$

las que, junto con las fórmulas (VI.C.14) determinan los elementos $\langle n'_2, n'_3, s' | \hat{G}_{ij} | n_2, n_3, s \rangle$. En la base ortonormal se obtiene

$$\begin{aligned} \langle n'_2, n'_3, t' | \hat{G}_{ij} | n_2, n_3, t \rangle &= \\ \sum_{s, s'} \langle n'_2, n'_3, s' | \hat{G}_{ij} | n_2, n_3, s \rangle C_{n'_2, n'_3}^{s't'} C_{n_2, n_3}^{st} / (\lambda_{n'_2, n'_3}^{t'} \lambda_{n_2, n_3}^t)^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{VI.C.19})$$

Notemos que a partir de la definición (VI.C.10),

$$|p,q,s\rangle = p|p-1,q+1,s-1\rangle + (\hat{G}_{s2})^{s-1}(\hat{G}_{s1})^q(\hat{G}_{21})^p\hat{G}_{s2}|0\rangle \quad (\text{VI.C.20})$$

de modo que si $r_2=0$, $|n_2,n_s,s\rangle$ es linealmente dependiente de $|n_2,n_s,0\rangle$, por lo que el índice s resulta innecesario.

Para una representación irreducible (r_1,r_2,r_3) con $r_3 \neq 0$, se debe efectuar el reemplazo $r'_1 = r_1 - r_3$, $r'_2 = r_2 - r_3$, $N' = N - nr_3$, y utilizar las fórmulas anteriores con las magnitudes primadas. Sólo deben modificarse los elementos de matriz diagonales, a los cuales debe sumarse el término r_3 .

En el caso de 2 niveles, (VI.C.1) se reduce a $D(r_1,r_2) = 2J+1$ con $J = \frac{1}{2}(r_1 - r_2)$. Las distintas representaciones irreducibles intervinientes difieren solamente en el valor de J .

Referencias:

1. R. Rossignoli and A. Plastino, Phys. Rev. C (en prensa).
2. R. Gilmore, 'Catastrophe Theory for Scientists and Engineers' (Wiley, N. Y., 1981).
R. Gilmore and D. H. Feng, Phys. Lett 85 B, 155 (1979).
3. J. Nuñez, A. Plastino, R. Rossignoli and M. Cambiaggio, Nucl. Phys. A 444, 35 (1985).
4. N. Canosa, A. Plastino and R. Rossignoli, Nucl. Phys. A 453, 417 (1986).
5. N. Meshkov, Phys. Rev. C3, 2214 (1971).
6. M. Hammermesh, 'Group Theory' (Addison Wesley, Reading., Mass., 1962).
R. Gilmore, 'Lie Groups, Lie Algebras, and Some of their Applications' (Wiley, N.Y., 1976).
7. R. Gilmore, Ann. of Phys. (N.Y.) 74, 391 (1972).

Figura 1. a: Valor inferido de g_{32} en función de g_{21} . Las líneas llenas corresponden a $g_{31} = 0.3 g_m$ (a), $0.6 g_m$ (b) y $0.9 g_m$ (c), con $g_{11} = 0.6$, y $g_m = [g_{11}g_{33}]^{1/2} = 0.3464$. Las líneas punteadas a $g_{31} = 0.7 g_m$ (d) y $0.9 g_m$ (e), con $g_{11} = 0.2$, y $g_m = 0.2828$.
b: Valor inferido de g_{32} en función de g_{11} , para $g_{21} = g_{31} = 0.1$ (a), 0.2 (b) y 0.3 (c). En todos los casos, $g_{22} = g_{33} = (1-g_{11})/2$.
Se suponen elementos no diagonales reales.

Figura 2. a - c: Evolución temporal de $\text{Re}(g_{21})$, $\text{Re}(g_{31})$ y g_{11} , de acuerdo a resultados de HFDT completo y restringido, indistinguibles en la escala de la figura (líneas llenas), y resultados exactos (líneas de trazos), para $v = 1.0$ y valores iniciales indicados (ver sección VI.6). El tiempo está expresado en unidades de $\hbar/(\epsilon_2 - \epsilon_1)$. Los resultados exactos corresponden al caso $N = 8$, con 6561 estados accesibles. La fig. 2-d muestra la entropía efectiva de p.i., construida con resultados exactos, para $N = 4$ (línea de trazos) y $N = 8$ (línea llena).

Figura 3. a - c: Las mismas cantidades de la Fig. 1, para el caso $v = 2.0$, y distintos valores iniciales de los elementos no diagonales. Las líneas llenas corresponden al tratamiento completo de HFDT, y las de trazos al tratamiento restringido. La evolución exacta es aproximadamente de la misma forma que en la fig. 1. La fig. 4-d muestra la entropía en el espacio restringido (IV.5.5), utilizando los resultados del tratamiento completo.

Figura 4. Evolución temporal de $\text{Re}(g_{a2})$ para las condiciones de la fig. 2 (a), y fig. 3 (b). Las líneas llenas indican la evolución según HFDT, y las de trazos el valor inferido en la aproximación restringida. La línea punteada en (a) corresponde a la evolución exacta.

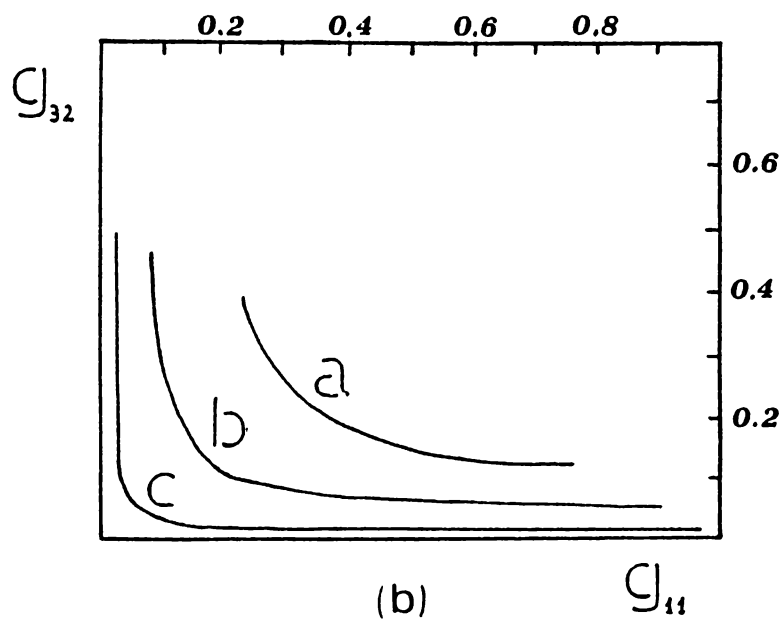
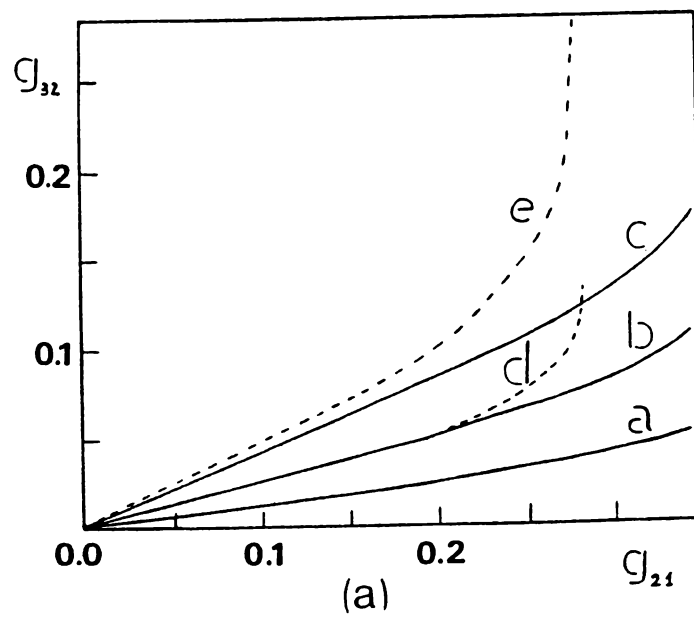


FIGURA 1

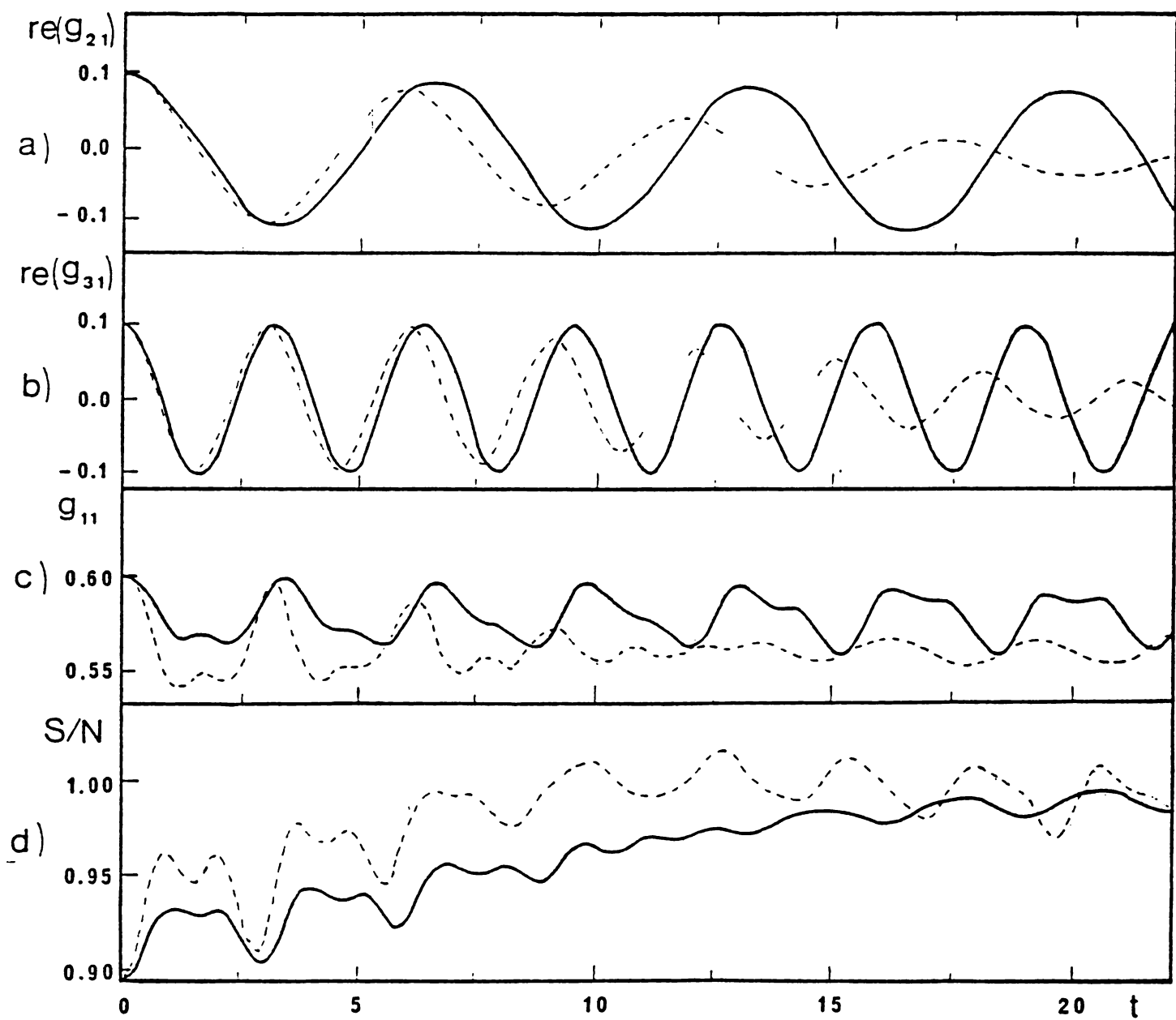


FIGURA 2

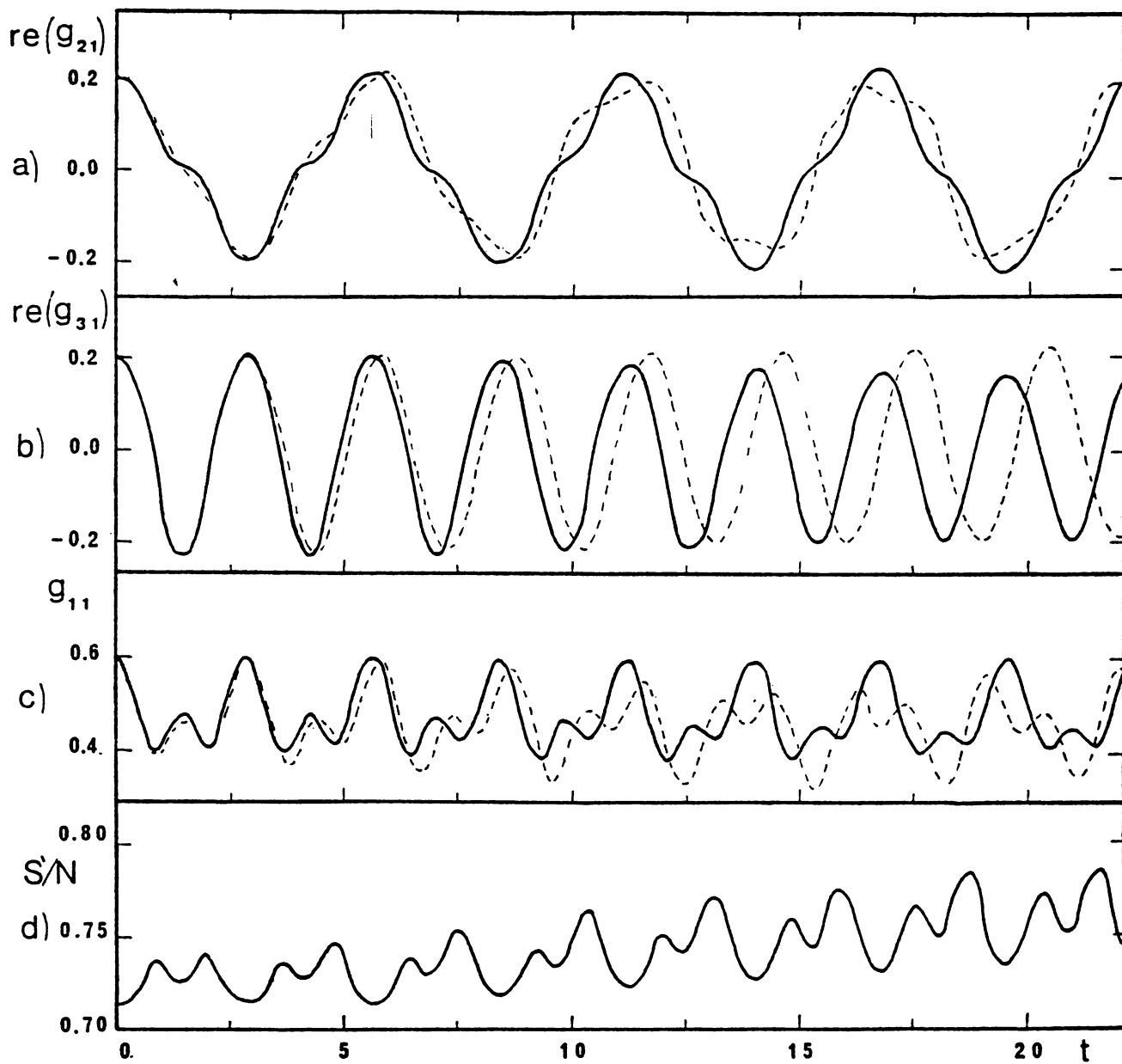


FIGURA 3

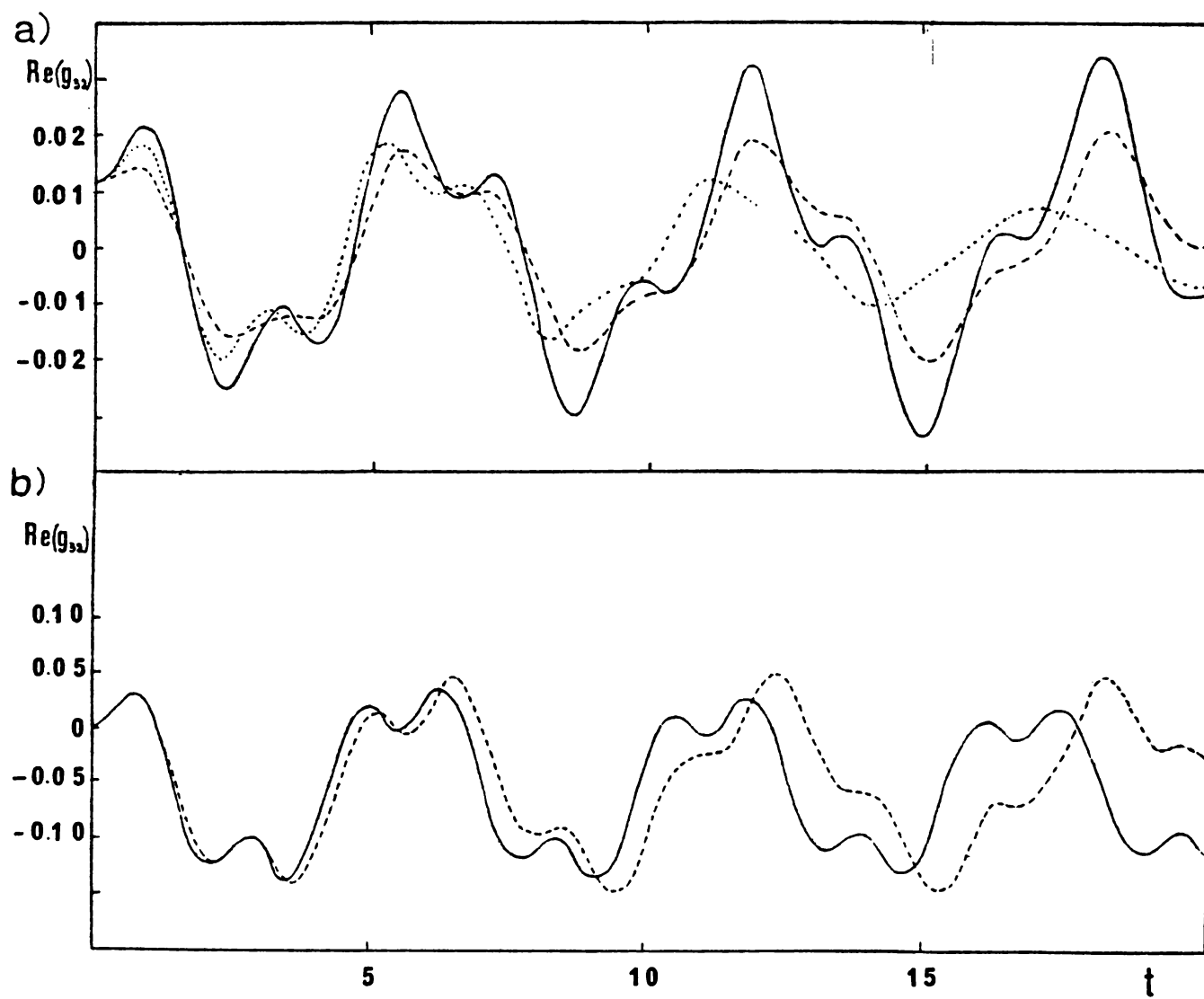


FIGURA 4

CONCLUSIÓN

El objetivo primordial de esta tesis ha sido analizar y extender las teorías cuánticas de campo medio, enmarcándolas en un contexto estadístico completamente general.

Nuestro formalismo ha sido presentado en los capítulos I y V, donde se extiende el tratamiento usual de campo medio a descripciones basadas en un conjunto arbitrario de observables, no necesariamente de un cuerpo, tanto en el caso estático como dinámico.

La situación particular en que los observables relevantes son operadores de un cuerpo es presentada en el capítulo II. Se desarrollan en este caso originales relaciones generales entre multiplicadores de Lagrange y los correspondientes valores medios, las que permiten abordar el caso de matrices densidad conocidas en forma parcial, en base al principio de máxima entropía. Se derivan también en forma original y general, las ecuaciones estadísticas autoconsistentes de campo medio (Hartree-Fock y Hartree-Fock Bogoliubov) en sistemas fermiónicos y la correspondiente extensión a sistemas bosónicos. Debido al contexto estadístico general, el formalismo es igualmente aplicable a situaciones fuera del equilibrio, proporcionando una descripción aproximada instantánea basada en observables de un cuerpo.

En el Capítulo III, se analizan efectos térmicos sobre la competencia entre interacciones monopulares y de apareamiento, dentro del marco de un modelo exactamente soluble, con la idea de examinar, a la luz de los resultados exactos, el comportamiento de

las aproximaciones de cuasipartícula independiente a temperatura finita.

El modelo exhibe, a pesar de su simplicidad, una gran variedad de transiciones de fase. Estas corresponden a $T=0$ a cambios abruptos en el estado fundamental del sistema, que surgen como consecuencia de variaciones en las constantes de acoplamiento de las interacciones presentes. A su vez, para valores fijos de las constantes, estos cambios se reflejan de distinta manera en respectivas transiciones que sufre el sistema al incrementarse la temperatura.

Un resultado importante es que en este contexto, las aproximaciones de cuasipartícula independiente a temperatura finita son exactas en el límite termodinámico, en distintos conjuntos estadísticos, tanto para la energía libre y la entropía, como para valores medios intensivos de observables arbitrarios contruídos con los operadores colectivos, cualquiera sea el hamiltoniano. Los valores medios intensivos de los operadores de Casimir, q , r , son identificados en este límite con combinaciones lineales de los números medios de ocupación f_j (autovalores de la matriz densidad de un cuerpo).

La aproximación térmica, o en general, estadística, puede ser útil aún a $T = 0$, pues en muchos casos los f_j no tienden a 0 en este límite. Esto ocurre cuando el estado fundamental es degenerado, proporcionando así el tratamiento estadístico una matriz densidad de un cuerpo con la simetría correcta.

La aproximación de estados coherentes ha sido generalizada con el objeto de incorporar fuerzas de apareamiento, y se muestra que coincide en el límite termodinámico con la aproximación

termica de cuasipartícula independiente.

Finalmente, hemos abordado el problema de la determinación de las fluctuaciones de los observables colectivos. Las fluctuaciones de observables escogidos son evaluadas en diferentes fases (normal, superconductora y deformada). Se discute el problema de como extraer esta información a partir de las soluciones de campo medio, obteniéndose importantes correcciones al teorema de Wick en las regiones críticas. Las expresiones corregidas proporcionan la fluctuación exacta en el límite termodinámico, y son capaces de predecir los pronunciados máximos que las fluctuaciones de algunos observables poseen en la región crítica para valores no muy pequeños del número de partículas.

En el capítulo IV, el formalismo estadístico de cuasipartícula independiente es aplicado a potenciales monodimensionales, y en particular, al problema del oscilador anarmónico a temperatura finita, utilizando la representación bosónica. La aproximación provee una cota superior a la energía libre, y es aplicable en forma simple y elegante al caso de un potencial general, proporcionando en el límite $T \rightarrow \infty$ expresiones asintóticas exactas de magnitudes termodinámicas. Se desarrollan también otras cotas superiores alternativas.

Se examinan en primer lugar potenciales pares con un sólo mínimo. La aproximación posee en este caso un sólo parámetro variacional, siendo los resultados ampliamente satisfactorios.

Se considera también la aplicación del formalismo a potenciales generales asimétricos y con varios mínimos, siendo necesaria en este caso la inclusión de la traslación como un segundo parámetro variacional. Esto corresponde a una ampliación

de la descripción en la aproximación de campo medio, incorporándose un nuevo observable en el exponente del operador densidad.

La aproximación puede exhibir en este caso 'transiciones de fase', que corresponden a cambios significativos (pero no abruptos) de la solución exacta. En el caso del potencial biestable por ejemplo, puede darse la existencia simultánea de una solución simétrica autoconsistente centrada en el origen, y una solución desplazada degenerada, que rompe con la simetría de paridad, lo que origina fenómenos críticos en la aproximación autoconsistente.

Existe también la posibilidad de que soluciones autoconsistentes no presentes a $T = 0$ aparezcan a temperatura finita. Se ilustra como ejemplo el caso del potencial anarmónico con un término cúbico, donde una solución 'cuasi-simétrica' es posible recién a partir de una determinada temperatura, para ciertos valores de las constantes de acoplamiento. En este caso, las soluciones presentes a $T = 0$ desaparecen a altas temperaturas.

Se discute finalmente el cálculo de la energía exacta, utilizándose para ello la diagonalización en una base (truncada) autoconsistente (que incluye traslaciones), lo cual mejora la convergencia.

En el capítulo V, los tratamientos autoconsistentes son aplicados al problema de la evolución temporal de operadores estadísticos, examinándose una situación general, en la que los observables relevantes no cierran un álgebra con el hamiltoniano. La característica común a todos los tratamientos autoconsistentes es la conservación de la entropía, y un cierre no lineal del

álgebra con el hamiltoniano. Se discute también el caso particular de las ecuaciones de HFDT estadísticas, en sistemas fermiónicos y bosónicos, y las correspondientes ecuaciones linealizadas.

El principal objetivo es el de ampliar la gama de posibilidades de HFDT. Situaciones iniciales de un carácter mucho más general que las exigidas por un tratamiento puro pueden ser consideradas, inclusive el caso particular en que la matriz densidad inicial es conocida sólo en forma parcial.

Otra posibilidad que surge en el tratamiento estadístico, es la de realizar un truncamiento sistemático de las ecuaciones de campo medio resultantes, excluyendo aquellos operadores de un cuerpo que por alguna razón no son de interés. De este modo, distintos tratamientos aproximados de HFDT pueden ser formulados, y su exactitud puede ser medida en base a entropías proyectadas.

Finalmente, en el capítulo VI se ilustran las consideraciones anteriores en un modelo exactamente soluble de simetría $U(n)$, con resultados numéricos para el caso $n = 3$. La evolución temporal exacta se construye utilizando todas las representaciones irreducibles intervinientes. Cabe destacar, que el tratamiento estadístico de p.i. se realiza en un conjunto de tipo canónico, evitando así fluctuaciones en el número de partículas. Al igual que en el capítulo III, la descripción de p.i. es exacta (para momentos intensivos de primer orden) en el límite termodinámico.

Como conclusión final, creemos que el rango de aplicación y la interpretación de las teorías de campo medio ha sido extendido, tanto en los aspectos estáticos como dinámicos. Se han realizado

estudios detallados de la aproximación en diversos sistemas, los cuales, a pesar de poseer solución exacta accesible, no pueden ser considerados como triviales, pues exhiben complejas propiedades que los convierten en auténticos paradigmas del problema cuántico de muchos cuerpos.

La filosofía básica que inspira esta Tesis es la de la Teoría de la Información: introducir un marco estadístico muy general que permite extraer conclusiones no triviales a partir de un óptimo procesamiento de la información disponible, mediante el principio de máxima entropía.

AGRADECIMIENTOS

Deseo agradecer en primer lugar al Dr. A. L. Plastino el valioso aporte de las discusiones con él mantenidas, y también el apoyo y optimismo brindados en todo momento.

Durante los años de Beca he contado con la permanente colaboración, apoyo y estímulo de mis padres y esposa, a quien debo además la gran ayuda prestada durante la realización de esta Tesis.

Deseo agradecer asimismo al Dr. O. Rosso, por haber facilitado el procesador de texto que hizo posible la impresión de esta Tesis, y también por la colaboración brindada durante todos estos años. Agradezco finalmente al Lic. R. Rodriguez por su aporte en los cálculos numéricos, y a todos los miembros del Grupo de Teoría Nuclear.

Durante la realización de esta Tesis, he contado con el apoyo económico del CONICET, a través de una Beca de Iniciación y posteriormente una Beca de Perfeccionamiento.

